

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局(43) 国際公開日
2002 年 8 月 15 日 (15.08.2002)

PCT

(10) 国際公開番号
WO 02/062770 A1(51) 国際特許分類⁷: C07D 261/10, 261/12, 413/12, 498/04, 513/04, 413/14, 417/12, 261/20, 487/04, A01N 43/80

(21) 国際出願番号: PCT/JP02/01015

(22) 国際出願日: 2002 年 2 月 7 日 (07.02.2002)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2001-031784 2001 年 2 月 8 日 (08.02.2001) JP

(71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): クミアイ化学工業株式会社 (KUMIAI CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD.) [JP/JP]; 〒110-0008 東京都台東区池之端 1 丁目 4 番 2 6 号 Tokyo (JP). イハラケミカル工業株式会社 (IHARA CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD.) [JP/JP]; 〒110-0008 東京都台東区池之端 1 丁目 4 番 2 6 号 Tokyo (JP).

(72) 発明者; および

(75) 発明者/出願人 (米国についてののみ): 中谷 昌央 (NAKATANI, Masao) [JP/JP]; 〒437-1213 静岡県磐田郡 福田町塩新田 4 0 8 番地の 1 株式会社 ケイ・アイ 研究所内 Shizuoka (JP). 久語 良太郎 (KUGO, Ryotaro) [JP/JP]; 〒590-0531 大阪府泉南市 岡田 5 丁目 2 7 番 2 3 号 Osaka (JP). 宮崎 雅弘 (MIYAZAKI, Masahiro) [JP/JP]; 〒437-1213 静岡県磐田郡 福田町塩新田 4 0 8 番地の 1 株式会社 ケイ・アイ 研究所内 Shizuoka (JP). 角 康一郎 (KAKU, Koichiro) [JP/JP]; 〒437-1207 静岡県磐田郡

福田町蛭池 2 7 6 番地の 1 Shizuoka (JP). 藤波 周 (FUJINAMI, Makoto) [JP/JP]; 〒439-0031 静岡県小笠郡 菊川町加茂 1 8 0 9 番地 Shizuoka (JP). 上野 良平 (UENO, Ryohei) [JP/JP]; 〒439-0031 静岡県小笠郡 菊川町加茂 1 8 0 9 番地 Shizuoka (JP). 高橋 智 (TAKAHASHI, Satoru) [JP/JP]; 〒420-0046 静岡県静岡市 吉野町 5 番地の 1 8 Shizuoka (JP).

(74) 代理人: 小林 雅人 (KOBAYASHI, Masato); 〒162-0825 東京都新宿区神楽坂 4 丁目 3 番地 煉瓦塔ビル 5 階 Tokyo (JP).

(81) 指定国 (国内): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NO, NZ, OM, PH, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI, SK, SL, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

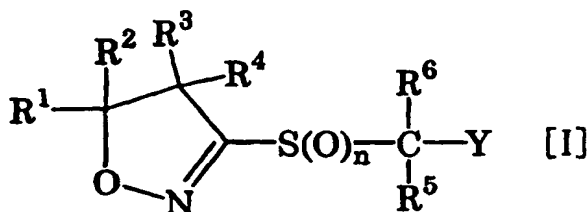
(84) 指定国 (広域): ARIPO 特許 (GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア特許 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ特許 (AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE, TR), OAPI 特許 (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:
— 国際調査報告書

2 文字コード及び他の略語については、定期発行される各 PCT ガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。

(54) Title: ISOXAZOLINE DERIVATIVE AND HERBICIDE COMPRISING THE SAME AS ACTIVE INGREDIENT

(54) 発明の名称: イソオキサゾリン誘導体及びこれを有効成分とする除草剤

(57) Abstract: An isoxazoline derivative which is represented by the general formula: [I] wherein R¹ and R² represent an alkyl group and may be the same or different, R³, R⁴, R⁵ and R⁶ represent a hydrogen atom, Y represents an aromatic heterocyclic group or aromatic condensed heterocyclic group which has a heteroatom selected from among a nitrogen atom, an oxygen atom and a sulfur atom, has five or six members, and may be substituted, and n represents an integer of 0 to 2. The isoxazoline derivative exhibits excellent herbicidal effect and selectivity between a crop and a weed.

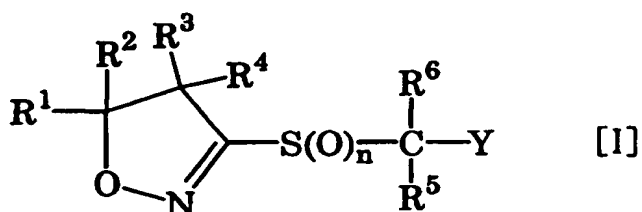
[続葉有]



(57) 要約:

本発明は、優れた除草効果と作物・雑草間の選択性を有するイソオキサゾリン誘導体を提供することを課題とする。

本発明のイソオキサゾリン誘導体は、一般式



[式中、

R¹及びR²は、同一又は異なって、アルキル基を示し、

R³, R⁴, R⁵, R⁶は、水素原子を示し、

Yは窒素原子、酸素原子及び硫黄原子より選択される任意のヘテロ原子を有する5～6員の置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基又は芳香族ヘテロ縮合環基を示し、

nは0～2の整数を示す。]

で表される。

明 細 書

イソオキサゾリン誘導体及びこれを有効成分とする除草剤

5 技術分野

本発明は新規なイソオキサゾリン誘導体及びそれを有効成分として含有する除草剤に関するものである。

背景技術

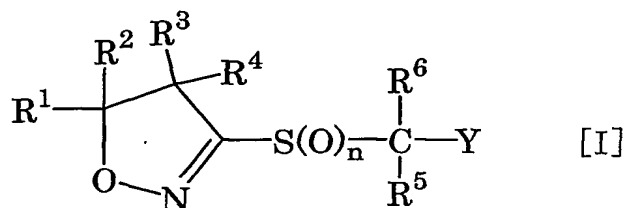
- 10 イソオキサゾリン誘導体が除草活性を有することは、例えば、特開平8-22558号公報、特開平9-328477号公報及び特開平9-328483号公報等に報告されている。しかしながら、以下に詳述する本発明化合物はこれらの文献に記載されていない。
- 有用作物に対して使用される除草剤は、土壌又は茎葉に施用し、低薬量で十分な除草効果を示し、しかも作物・雑草間に高い選択性を発揮する薬剤であることが望
- 15 まれる。これらの点で、当該公報に記載の化合物は必ずしも満足すべきものとはいえない。

発明の開示

- 本発明者らはこのような状況に鑑み、各種化合物の除草効果と作物・雑草間の選択
- 20 性を検討した結果、新規なイソオキサゾリン誘導体が、優れた除草効果と作物・雑草間の選択性を有することを見だし、本発明を完成するに至った。

即ち、本発明は

(1) 一般式 [I] を有するイソオキサゾリン誘導体又はその薬理上許容される塩：



式中、

5 R^1 及び R^2 は、同一又は異なって、水素原子、C1～C10アルキル基、C3～C8シクロアルキル基又はC3～C8シクロアルキルC1～C3アルキル基を示すか、或いは R^1 と R^2 とが一緒になって、これらの結合した炭素原子と共に形成したC3～C7のスピロ環を示し、

10 R^3 及び R^4 は、同一又は異なって、水素原子、C1～C10アルキル基又はC3～C8シクロアルキル基を示すか、或いは R^3 と R^4 とが一緒になって、これらの結合した炭素原子と共に形成したC3～C7のスピロ環を示し、更に R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 はこれらの結合した炭素原子と共に5～8員環を形成することもでき、

R^5 及び R^6 は、同一又は相異なって、水素原子又はC1～C10アルキル基を示し、

15 Yは窒素原子、酸素原子及び硫黄原子より選択される1以上の任意のヘテロ原子を有する5～6員の芳香族ヘテロ環基又は芳香族ヘテロ縮合環基を示し、これらのヘテロ環基は置換基群 α より選択される、0～6個の同一又は相異なる基で置換されていてもよく、又、隣接したアルキル基同士、アルコキシ基同士、アルキル基とアルコキシ基、アルキル基とアルキルチオ基、アルキル基とアルキルスルホニル基、アルキル基とモノアルキルアミノ基又はアルキル基とジアルキルアミノ基が2個結合して1～4個のハロゲン原子で置換されてもよい5～8員環を形成されてい

20 てもよく、又、これらのヘテロ環基のヘテロ原子が窒素原子の時は酸化されてN-オキシドになってもよく、

nは0～2の整数を示す。

「置換基群 α 」

- 水酸基、チオール基、ハロゲン原子、C1～C10アルキル基、置換基群 β より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキル基、C1～C4ハロアルキル基、C3～C8シクロアルキル基、C1～C10アルコキシ基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルコキシ基、C1～C4ハロアルコキシ基、C3～C8シクロアルキルオキシ基、C3～C8シクロアルキルC1～C3アルキルオキシ基、C1～C10アルキルチオ基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルチオ基、C1～C4ハロアルキルチオ基、C2～C6アルケニル基、C2～C6アルケニルオキシ基、C2～C6アルキニル基、C2～C6アルキニルオキシ基、C1～C10アルキルスルフィニル基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルスルフィニル基、C1～C10アルキルスルホニル基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルフィニル基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルスルホニルオキシ基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基、C1～C10アルキルスルホニルオキシ基、C1～C4ハロアルキルスルホニルオキシ基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいフェノキシ基、置換されていてもよいフェニルチオ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環オキシ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環チオ基、置換されていてもよいフェニルスルフィニル基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、置換されていてもよいフェニルスルホニルオキシ基、アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、カルボキシ基、C1～C10アルコキシカルボニル基、置換されていてもよいベンジルオキシカルボニル基、置換されていてもよいフェノキシカルボニル基、シアノ基、カルバモイル基（該基の窒素原

子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基又は置換されていてもよいフェニル基で置換されていてもよい。）、C1～C6アシルオキシ基、C1～C4ハロアルキルカルボニルオキシ基、置換されていてもよいベンジルカルボニルオキシ基、置換されていてもよいベンゾイルオキシ基、ニトロ基、アミノ基（該基の窒素原子は同一

- 5 又は異なって、C1～C10アルキル基、置換されていてもよいフェニル基、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいベンジルスルホニル基又は置換されていてもよいフェニルスルホニル基で置換されていてもよい。）
- 10 い。）

「置換基群β」

- 水酸基、C3～C8シクロアルキル基（該基はハロゲン原子又はアルキル基で置換されてもよい）、C1～C10アルコキシ基、C1～C10アルキルチオ基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C10アルコキシカルボニル基、C2～C6ハロアルケ
- 15 ニル基、アミノ基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基で置換されていてもよい）、カルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基で置換されていてもよい）、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、C1～
- 20 C10アルコキシイミノ基、シアノ基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいフェノキシ基

「置換基群γ」

- C1～C10アルコキシカルボニル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、シアノ基、カルバモイル基（該基の窒素原子は
- 25 同一又は異なって、C1～C10アルキル基で置換されていてもよい。）

(2) 0～6個の同一又は相異なる基で置換されていてもよいヘテロ環上の置換基群 α が、水酸基、ハロゲン原子、C1～C10アルキル基、置換基群 β より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキル基、C1～C4ハロアルキル基、C3～C8シクロアルキル基、C1～C10アルコキシ基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルコキシ基、C1～C4ハロアルコキシ基、C3～C8シクロアルキルオキシ基、C3～C8シクロアルキルC1～C3アルキルオキシ基、C1～C10アルキルチオ基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルチオ基、C1～C4ハロアルキルチオ基、C2～C6アルケニル基、C2～C6アルケニルオキシ基、C2～C6アルキニル基、C2～C6アルキニルオキシ基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいフェノキシ基、置換されていてもよいフェニルチオ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環オキシ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環チオ基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、カルボキシ基、C1～C10アルコキシカルボニル基、シアノ基、カルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基又は置換されていてもよいフェニル基で置換されていてもよい。）、ニトロ基、アミノ基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基、置換されていてもよいフェニル基、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいベンジルスルホニル基又は置換されていてもよいフェニルスルホニル基で置換されていてもよい。）であるか、或いは隣接したアルキル基同士、アルコキシ基同士、ア

ルキル基とアルコキシ基、アルキル基とアルキルチオ基、アルキル基とアルキルスルホニル基、アルキル基とモノアルキルアミノ基又はアルキル基とジアルキルアミノ基が2個結合して1～4個のハロゲン原子で置換されてもよい5～8員環を形成されていてもよい(1)に記載のイソオキサゾリン誘導体。

- 5 (3) 0～6個の同一又は相異なる基で置換されていてもよいヘテロ環上の置換基群 α が、ハロゲン原子、C1～C10アルキル基、C1～C4ハロアルキル基、C1～C10アルコキシC1～C3アルキル基、C3～C8シクロアルキル基(該基はハロゲン原子又はアルキル基で置換されてもよい)、C1～C10アルコキシ基、C1～C4ハロアルコキシ基、C3～C8シクロアルキルC1～C3アルキルオキシ基、置換されてい
- 10 てもよいフェノキシ基、C1～C10アルキルチオ基、C1～C10アルキルスルホニル基、アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、C1～C10アルコキシカルボニル基、シアノ基又はカルバモイル基(該基の窒素原子は同一又は異なってC1～C10アルキル基で置換されていてもよい)である(2)に記載のイソオキサゾリン誘導体。
- 15 (4) R^1 及び R^2 が、同一又は異なってメチル基もしくはエチル基、 R^3 、 R^4 、 R^5 及び R^6 が水素原子である(1)、(2)又は(3)のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体。

- (5) Yが、窒素原子、酸素原子及び硫黄原子より選択される任意のヘテロ原子を有する5員環又は6員環の芳香族ヘテロ環基である(1)、(2)、(3)又は(4)
- 20 のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体。

(6) Yが、チエニル基、ピラゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、ピリジル基又はピリミジニル基である(5)に記載のイソオキサゾリン誘導体。

- (7) Yが、チオフェン-3-イル基、ピラゾール-4-イル基、ピラゾール-5-イル基、イソオキサゾール-4-イル基、イソチアゾール-4-イル基、ピリジン-3-イル基又はピリミジン-5-イル基である(6)に記載のイソオキサゾリ
- 25

ン誘導体。

(8) Yが、チオフェン-3-イル基で、置換基群 α がチオフェン環の2及び4位に置換した(7)に記載のイソオキサゾリン誘導体。

(9) Yが、ピラゾール-4-イル基で、置換基群 α がピラゾール環の3及び5位
5 に、更に1位に水素原子、C1~C10アルキル基、置換基群 β より選択される任意の基でモノ置換されたC1~C10アルキル基、C1~C4ハロアルキル基、C3~C8シクロアルキル基、C2~C6アルケニル基、C2~C6アルキニル基、C1~C10アルキルスルフィニル基、C1~C10アルキルスルホニル基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1~C10アルキルスルホニル基、C1~C4ハロアル
10 キルスルホニル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、アシル基、C1~C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、C1~C10アルコキシカルボニル基、置換されていてもよいベンジルオキシカルボ
15 ニル基、置換されていてもよいフェノキシカルボニル基、カルバモイル基(該基の窒素原子は同一又は異なって、C1~C10アルキル基又は置換されていてもよいフェニル基で置換されていてもよい)、アミノ基(該基の窒素原子は同一又は異なって、C1~C10アルキル基、置換されていてもよいフェニル基、アシル基、C1~C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換
20 されていてもよいベンゾイル基、C1~C10アルキルスルホニル基、C1~C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいベンジルスルホニル基又は置換されていてもよいフェニルスルホニル基で置換されていてもよい)が置換した(7)に記載のイソオキサゾリン誘導体。

(10) Yが、ピラゾール-5-イル基で、置換基群 α がピラゾール環の4位に、
25 更に1位に水素原子、C1~C10アルキル基、置換基群 β より選択される任意の基

でモノ置換されたC1～C10アルキル基、C1～C4ハロアルキル基、C3～C8シクロアルキル基、C2～C6アルケニル基、C2～C6アルキニル基、C1～C10アルキルスルフィニル基、C1～C10アルキルスルホニル基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、C1～C10アルコキシカルボニル基、置換されていてもよいベンジルオキシカルボニル基、置換されていてもよいフェノキシカルボニル基、カルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基又は置換されていてもよいフェニル基で置換されていてもよい）、アミノ基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基、置換されていてもよいフェニル基、アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいベンジルスルホニル基又は置換されていてもよいフェニルスルホニル基で置換されていてもよい）が必ず置換した(7)に記載のイソオキサゾリン誘導体。

(11) Yが、イソオキサゾール-4-イル基で、置換基群 α がイソオキサゾール環の3位及び5位に置換した(7)に記載のイソオキサゾリン誘導体。

(12) Yが、イソチアゾール-4-イル基で、置換基群 α がイソチアゾール環の3位及び5位に置換した(7)に記載のイソオキサゾリン誘導体。

(13) Yが、ピリジン-3-イル基で、置換基群 α がピリジン環の2位及び4位に置換した(7)に記載のイソオキサゾリン誘導体。

(14) Yが、ピリミジン-5-イル基で、置換基群 α がピリミジン環の4位及び

6 位に置換した (7) 記載のイソオキサゾリン誘導体。

(15) n が 2 である (1) ~ (14) のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体。

5 (16) n が 1 である (1) ~ (14) のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体。

(17) n が 0 である (1) ~ (14) のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体。

(18) (1) ~ (17) のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体又は薬理上許容される塩を有効成分として含有する除草剤。

10 尚、本明細書において、用いられる用語の定義を以下に示す。

C1~C10等の表記は、この場合ではこれに続く置換基の炭素数が、1~10であることを示している。

ハロゲン原子とは、フッ素原子、塩素原子、臭素原子又はヨウ素原子を示す。

15 C1~C10アルキル基とは、特に限定しない限り、炭素数が1~10の直鎖又は分岐鎖状のアルキル基を示し、例えばメチル基、エチル基、 n -プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、イソブチル基、 sec -ブチル基、 $tert$ -ブチル基、 n -ペンチル基、イソペンチル基、ネオペンチル基、 n -ヘキシル基、イソヘキシル基、3,3-ジメチルブチル基、ヘプチル基、又はオクチル基等を挙げることができる。

20 C3~C8シクロアルキル基とは、炭素数が3~8のシクロアルキル基を示し、例えばシクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、又はシクロヘキシル基等を挙げることができる。

C3~C8シクロアルキルC1~C3アルキル基(該基はハロゲン原子又はアルキル基で置換されてもよい)とは、特に限定しない限り、同一又は異なって、ハロゲン
25 原子1~4又はC1~C3アルキル基で置換されてもよいC3~C8シクロアルキル

基により置換されたC1～C3アルキル基を示し、例えばシクロプロピルメチル基、1-シクロプロピルエチル基、2-シクロプロピルエチル基、1-シクロプロピルプロピル基、2-シクロプロピルプロピル基、3-シクロプロピルプロピル基、シクロブチルメチル基、シクロペンチルメチル基、シクロヘキシルメチル基、2-クロロシクロプロピルメチル基、2,2-ジクロロシクロプロピルメチル基、2-フルオロシクロプロピルメチル基、2,2-ジフルオロシクロプロピルメチル基、2-メチルシクロプロピルメチル基、2,2-ジメチルシクロプロピルメチル基、又は2-メチルシクロプロピルエチル基等を挙げることができる。

10 C3～C8シクロアルキルC1～C3アルキル基とは、炭素数が3～8のシクロアルキル基により置換された炭素数1～3のアルキル基を示し、例えばシクロプロピルメチル基、1-シクロプロピルエチル基、2-シクロプロピルエチル基、1-シクロプロピルプロピル基、2-シクロプロピルプロピル基、3-シクロプロピルプロピル基、シクロブチルメチル基、シクロペンチルメチル基、又はシクロヘキシルメチル基等を挙げることができる。

15 C1～C4ハロアルキル基とは、特に限定しない限り、同一又は異なって、ハロゲン原子1～9で置換されている炭素数が1～4の直鎖又は分岐鎖のアルキル基を示し、例えばフルオロメチル基、クロロメチル基、ブromoメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、2,2-ジフルオロエチル基、2,2,2-トリフルオロエチル基、又はペンタフルオロエチル基等を挙げることができる。

20 C2～C6アルケニル基とは、炭素数が2～6の直鎖又は分岐鎖のアルケニル基を示し、例えばエテニル基、1-プロペニル基、2-プロペニル基、イソプロペニル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、又は2-ペンテニル基等を挙げることができる。

25 C2～C6アルキニル基とは、炭素数が2～6の直鎖又は分岐鎖のアルキニル基を示し、例えばエチニル基、2-プロピニル基、1-メチル-2-プロピニル基、2

ーブチニル基、3-ブチニル基、又は2-メチルー3-ブチニル基等を挙げることができる。

- 5 C2~C6ハロアルケニル基とは、特に限定しない限り、同一又は異なって、ハロゲン原子1~4で置換されている炭素数が2~6の直鎖又は分岐鎖のアルケニル基を示し、例えば3-クロロ-2-プロペニル基、又は2-クロロ-2-プロペニル基等を挙げることができる。

- 10 C1~C10アルコキシ基とは、アルキル部分が上記の意味である（アルキル）-O-基を示し、例えばメトキシ基、エトキシ基、n-プロポキシ基、イソプロポキシ基、tert-ブトキシ基、n-ブトキシ基、sec-ブトキシ基、又はイソブトキシ基等を挙げることができる。

C1~C4ハロアルコキシ基とは、ハロアルキル部分が上記の意味である（ハロアルキル）-O-基を示し、例えばジフルオロメトキシ基、トリフルオロメトキシ基、2,2-ジフルオロエトキシ基、又は2,2,2-トリフルオロエトキシ基等を挙げることができる。

- 15 C3~C8シクロアルキルオキシ基とは、シクロアルキル部分が上記の意味である（シクロアルキル）-O-基を示し、例えばシクロプロピルオキシ基、シクロブチルオキシ基、シクロペンチルオキシ基、又はシクロヘキシルオキシ基等を挙げることができる。

- 20 C3~C8シクロアルキルC1~C3アルキルオキシ基とは、シクロアルキルアルキル部分が上記の意味である（シクロアルキルアルキル）-O-基を示し、例えばシクロプロピルメトキシ基、1-シクロプロピルエトキシ基、2-シクロプロピルエトキシ基、1-シクロプロピルプロポキシ基、2-シクロプロピルプロポキシ基、3-シクロプロピルプロポキシ基、シクロブチルメトキシ基、シクロペンチルメトキシ基、又はシクロヘキシルメトキシ基等を挙げることができる。

- 25 C2~C6アルケニルオキシ基及びC2~C6アルキニルオキシ基とは、アルケニル

又はアルキニル部分が上記の意味である（アルケニル）－O－基、（アルキニル）－O－基を示し、例えば2－プロペニルオキシ基、又は2－プロピニルオキシ基等を挙げることができる。

- 5 C1～C10アルコキシイミノ基とは、アルコキシ部分が上記の意味である（アルコキシ）－N＝基を示し、例えばメトキシイミノ基又はエトキシイミノ基等を挙げる
ことができる。

- 10 C1～C10アルキルチオ基、C1～C10アルキルスルフィニル基及びC1～C10アルキルスルホニル基とは、アルキル部分が上記の意味である（アルキル）－S－基、（アルキル）－SO－基、（アルキル）－SO₂－基を示し、例えばメチルチオ基、エチルチオ基、
n－プロピルチオ基、イソプロピルチオ基、メチルスルフィニル基、メチルスルホニル基、エチルスルホニル基、
n－プロピルスルホニル基、又はイソプロピルスルホニル基等を挙げる
ことができる。

- 15 C1～C10アルキルスルホニルオキシ基とは、アルキルスルホニル部分が上記の意味である（アルキルスルホニル）－O－基を示し、例えばメチルスルホニルオキシ基又はエチルスルホニルオキシ基等を挙げる
ことができる。

C1～C10アルコキシカルボニル基とは、アルコキシ部分が上記の意味である（アルコキシ）－CO－基を示し、例えばメトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基、n－プロポキシカルボニル基、又はイソプロポキシカルボニル基等を挙げる
ことができる。

- 20 C1～C6アシル基とは、炭素数1～6の直鎖又は分岐鎖状の脂肪族アシル基を示し、例えばホルミル基、アセチル基、プロピオニル基、イソプロピオニル基、ブチリル基、又はピバロイル基等を挙げる
ことができる。

- 25 C1～C10アシルオキシ基とは、アシル部分が上記の意味である（アシル）－O－基、を示し、例えばアセトキシ基、プロピオニルオキシ基、イソプロピオニルオキシ基、又はピバロイルオキシ基等を挙げる
ことができる。

C1～C4ハロアルキルカルボニル基、C1～C4ハロアルキルチオ基及びC1～C4ハロアルキルスルホニル基とは、ハロアルキル部分が上記の意味である（ハロアルキル）－CO－基、（ハロアルキル）－S－基、（ハロアルキル）－SO₂－基を示し、例えばクロロアセチル基、トリフルオロアセチル基、ペンタフルオロプロピ
5 オニル基、ジフルオロメチルチオ基、トリフルオロメチルチオ基、クロロメチルスルホニル基、ジフルオロメチルスルホニル基、又はトリフルオロメチルスルホニル基等を挙げることができる。

C1～C4ハロアルキルカルボニルオキシ基及びC1～C4ハロアルキルスルホニルオキシ基とは、ハロアルキルカルボニル部分及びハロアルキルスルホニル部分が
10 上記の意味である（ハロアルキルカルボニル）－O－基、（ハロアルキルスルホニル）－O－基を示し、例えばクロロアセチルオキシ基、トリフルオロアセチルオキシ基、クロロメチルスルホニルオキシ基、又はトリフルオロメチルスルホニルオキシ基等を挙げることができる。

（置換されていてもよい）フェニル基、（置換されていてもよい）芳香族ヘテロ
15 環基、（置換されていてもよい）フェノキシ基、（置換されていてもよい）芳香族ヘテロ環オキシ基、（置換されていてもよい）フェニルチオ基、（置換されていてもよい）芳香族ヘテロ環チオ基、（置換されていてもよい）フェニルスルホニル基、（置換されていてもよい）フェニルスルホニルオキシ基、（置換されていてもよい）芳香族ヘテロ環スルホニル基、（置換されていてもよい）ベンジルカルボニル基、
20 （置換されていてもよい）ベンジルカルボニルオキシ基、（置換されていてもよい）ベンジルスルホニル基、（置換されていてもよい）ベンゾイル基、（置換されていてもよい）ベンゾイルオキシ基、（置換されていてもよい）ベンジルオキシカルボニル基又は（置換されていてもよい）フェノキシカルボニル基における「置換されていてもよい」とは、例えばハロゲン原子、C1～C10アルキル基、C1～C4ハロ
25 アルキル基、C1～C10アルコキシアルキル基、C1～C10アルコキシ基、C1～C

10アルキルチオ基、C1～C10アルキルスルホニル基、アシル基、C1～C10アルコキシカルボニル基、シアノ基、カルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基で置換されていてもよい）、ニトロ基、又はアミノ基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基、C1～C6アシル基、C1
5 ～C4ハロアルキルカルボニル基、C1～C10アルキルスルホニル基、又はC1～C4ハロアルキルスルホニル基で置換されていてもよい）等で置換されていてもよいことを示す。

窒素原子、酸素原子及び硫黄原子から任意に選択される1以上のヘテロ原子を有する5員から6員の芳香族ヘテロ環基とは、例えばヘテロ原子を1から3個有する
10 フリル基、チエニル基、ピロリル基、ピラゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、イミダゾリル基、ピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、トリアゾリル基、オキサジアゾリル基又はチアジアゾリル基を挙げることができる。

芳香族ヘテロ縮合環基とは、窒素原子、酸素原子及び硫黄原子から任意に選択されるヘテロ原子を1～3個有する基を示し、例えばベンゾフリル基、ベンゾチエニル基、インドリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、インダゾリル基、キノリル基、イソキノリル基、フサラジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基又はベンゾトリアゾリル基を挙げることができる。

20 （置換されていてもよい）芳香族ヘテロ環基、（置換されていてもよい）芳香族ヘテロ環オキシ基、（置換されていてもよい）芳香族ヘテロ環チオ基又は（置換されていてもよい）芳香族ヘテロ環スルホニル基の芳香族ヘテロ環とは、窒素原子、酸素原子及び硫黄原子から任意に選択されるヘテロ原子を1～3個有する5～6
25 員の基を示し、例えばフリル基、チエニル基、ピロリル基、ピラゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、イミダゾリル基、

ピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、トリアゾリル基、オキサジアゾリル基又はチアジアゾリル基を挙げることができる。

薬理上許容される塩とは、一般式 [I] を有する化合物において、水酸基、カルボキシル基又はアミノ基等がその構造中に存在する場合に、これらと金属もしくは

- 5 有機塩基との塩又は鉍酸もしくは有機酸との塩であり、金属としてはナトリウム又はカリウム等のアルカリ金属或いはマグネシウム又はカルシウム等のアルカリ土類金属を挙げることができ、有機塩基としてはトリエチルアミン又はジイソプロピルアミン等を挙げることができ、鉍酸としては塩酸又は硫酸等を挙げることができ、有機酸としては酢酸、メタンスルホン酸又はp-トルエンスルホン酸等を挙げること
- 10 ができる。

上記した一般式 [I] の中で好ましくは、 R^1 及び R^2 が、同一又は異なってメチル基又はエチル基であり、

R^3 、 R^4 、 R^5 及び R^6 が水素原子であり、

n が2であり、

- 15 Yがチオフェン-3-イル基（ここで該基の2位及び4位は、ハロゲン原子、アルキル基、ハロアルキル基、アルコキシアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、ハロアルコキシ基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、アルコキシカルボニル基、シアノ基又はカルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なってアルキル基で置換されていてもよい）が置換する。） 、
- 20 ピラゾール-4-イル基（ここで該基の3位及び5位は、ハロゲン原子、アルキル基、ハロアルキル基、アルコキシアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、ハロアルコキシ基、シクロアルキルアルキルオキシ基、置換されていてもよいフェノキシ基、アルキルチオ基、アルキルスルホニル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、アルコキシカルボニル基、シアノ基又はカルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なってアルキル基で置換されていてもよい）が、更に1位に水素原
- 25

- 子、アルキル基、置換基群 β より選択される任意の基でモノ置換されたアルキル基、ハロアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルキルスルホニル基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたアルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されて
- 5 いてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、アルコキシカルボニル基、置換されていてもよいベンジロキシカルボニル基、置換されていてもよいフェノキシカルボニル基又はカルバモイル基（該基の
- 10 窒素原子は同一又は異なって、アルキル基又は置換されていてもよいフェニル基で置換されていてもよい）が置換する。） 、
- ピラゾールー5-イル基（ここで該基の4位はハロゲン原子、アルキル基、ハロアルキル基、アルコキシアルキル基、ハロアルコキシ基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、アルコキシカルボニル基、シアノ基又はカルバモイル基（該基の窒素
- 15 原子は同一又は異なってアルキル基で置換されていてもよい）が、更に1位は水素原子、アルキル基、置換基群 β より選択される任意の基でモノ置換されたアルキル基、ハロアルキル基、シクロアルキル基又は置換されていてもよいフェニル基が置換する。） 、
- イソオキサゾールー4-イル基（該基の3位及び5位は、ハロゲン原子、アルキル
- 20 基、ハロアルキル基、アルコキシアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、ハロアルコキシ基、アルキルチオ基、アルキルスルホニル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、アルコキシカルボニル基、シアノ基又はカルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なってアルキル基で置換されていてもよい）が置換する。） 、
- イソチアゾールー4-イル基（該基の3位及び5位は、ハロゲン原子、アルキル基、
- 25 ハロアルキル基、アルコキシアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、ハロ

アルコキシ基、置換されていてもよいフェノキシ基、アルキルチオ基、アルキルスルホニル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、アルコキシカルボニル基、シアノ基、カルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なってアルキル基で置換されていてもよい）が置換する。） 、

- 5 ピリジン-3-イル基（該基の2位及び4位は、ハロゲン原子、アルキル基、ハロアルキル基、アルコキシアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、ハロアルコキシ基、アルキルチオ基、アルキルスルホニル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、アルコキシカルボニル基、シアノ基又はカルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なってアルキル基で置換されていてもよい）が置換する。） 、或いは、

- 10 ピリミジン-5-イル基（該基の4位および6位は、ハロゲン原子、アルキル基、ハロアルキル基、アルコキシアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、ハロアルコキシ基、アルキルチオ基、アルキルスルホニル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、アルコキシカルボニル基、シアノ基又はカルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なってアルキル基で置換されていてもよい）が置換する。）で
- 15 ある。

発明を実施するための最良の形態

- 次に、一般式 [I] を有する本発明化合物の代表的な化合物例を表1～表10に記載する。しかしながら、本発明化合物はこれらに限定されるものではない。

本明細書における表中の次の表記は下記の通りそれぞれ該当する基を表す。

- | | | | |
|---------|--------------|------|--------------|
| Me | : メチル基 | Et | : エチル基、 |
| Pr | : n-プロピル基 | Pr-i | : イソプロピル基 |
| Pr-c | : シクロプロピル基 | Bu | : n-ブチル基 |
| 25 Bu-i | : i s o-ブチル基 | Bu-s | : s e c-ブチル基 |

Bu-t : tert-ブチル基 Bu-c : シクロブチル基

Pen : n-ペンチル基 Pen-c : シクロペンチル基

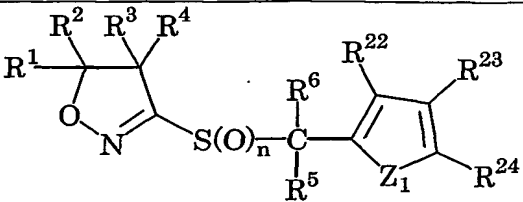
Hex : n-ヘキシル基 Hex-c : シクロヘキシル基

Ph : フェニル基

- 5 又、例えば(4-Cl)Phの表記は4-クロロフェニル基、3-Hexは3-ヘキシル基を表す。

尚、本発明化合物は置換基として水酸基を含む場合、ケト-エノール互変異性体を有する化合物があるが、何れの異性体もその混合物も本発明化合物に含まれる。

表 1

										
R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Z ¹	R ²²	R ²³	R ²⁴
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	H	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	H	H	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	H	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	H	H	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	OMe	H	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	OEt	H	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	OCH ₂ Ph	H	H
Me	Me	H	H	2	H	H	O	H	H	H
Me	Me	H	H	2	H	H	O	H	H	C(=O)OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	Me	H	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	Me	C(=O)OMe	CH ₂ C(=O)OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	Me	C(=O)OEt	CH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	Me	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OMe	H	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OEt	H	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OCHF ₂	H	H
H	H	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	H	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	H	Me	H	2	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	2	Me	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	2	Et	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	2	Pr-i	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	2	Me	Me	S	OCHF ₂	H	H
Me	Et	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Et	Et	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Pr-i	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Pr	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Pr-c	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	H	H
-(CH ₂) ₂ -		H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl

	-(CH ₂) ₃ -	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
	-(CH ₂) ₄ -	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
	-(CH ₂) ₅ -	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₃ -	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₄ -	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	H	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	H	H	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	H	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	H	H	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	OMe	H	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	OEt	H	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	OCH ₂ Ph	H	H
Me	Me	H	H	1	H	H	O	H	H	H
Me	Me	H	H	1	H	H	O	H	H	C(=O)OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	Me	H	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	Me	C(=O)OMe	CH ₂ C(=O)OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	Me	C(=O)OEt	CH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	Me	Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	OMe	H	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	OEt	H	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	OCHF ₂	H	H
H	H	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	H	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	H	Me	H	1	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	1	Me	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	1	Et	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	1	Pr-i	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	1	Me	Me	S	OCHF ₂	H	H
Me	Et	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Et	Et	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Pr-i	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Pr	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Pr-c	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	H	H
	-(CH ₂) ₂ -	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
	-(CH ₂) ₃ -	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
	-(CH ₂) ₄ -	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl

	-(CH ₂) ₅ -	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₃ -		H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₄ -		H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₅ -		H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₆ -		H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	H	H	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	H	H	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	OMe	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	OEt	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	OCH ₂ Ph	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	O	H	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	O	H	H	C(=O)OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	Me	H	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	Me	C(=O)OMe	CH ₂ C(=O)OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	Me	C(=O)OEt	CH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	Me	Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	OMe	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	OEt	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	OCHF ₂	H	H
H	H	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	H	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	H	Me	H	0	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	0	Me	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	0	Et	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	0	Pr-i	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Me	H	H	0	Me	Me	S	OCHF ₂	H	H
Me	Et	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Et	Et	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Pr-i	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Pr	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	Pr-c	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	H	H
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	H	H
	-(CH ₂) ₂ -	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
	-(CH ₂) ₃ -	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
	-(CH ₂) ₄ -	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
	-(CH ₂) ₅ -	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₃ -		H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl

H	-(CH ₂) ₄ -	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Et	H	2	H	H	S	H	H	H
Me	Et	H	2	H	H	O	H	H	H
Me	Et	H	2	H	H	NH	H	H	H

表 2

R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Z ²	R ²⁵	R ²⁶	R ²⁷
Me	Me	H	H	2	H	H	S	H	H	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	H	OMe	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	H	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	NHMe	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	N(Me) ₂	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	NHC(=O)Me	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	NHC(=O)Ph	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	NHSO ₂ Me	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	NHSO ₂ Ph	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=O)OMe	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=O)OEt	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=O)OPh	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	CN	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=O)NHMe	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=O)Et	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=O)Pr-i	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=O)Pr	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=O)CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=NOMe)Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Ph	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Ph	C(=NOMe)Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	OMe	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	OEt	H

Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	OPr-i	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	OPr-i	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	CN	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	C(=O)NHMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	C(=O)N(Me) ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	C(=O)Et	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	C(=O)Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	C(=O)Pr	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	C(=NOMe)Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	O	H	H	H
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	H	Cl
H	H	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	H	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	H	Me	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	2	Me	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	2	Et	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	2	Pri	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	2	Me	Me	S	Cl	Cl	Cl
Me	Et	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Et	Et	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Pr-i	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Pr	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Pr-c	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₂ -		H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₃ -		H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₄ -		H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₅ -		H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₃ -	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₄ -	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	H	H	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	H	OMe	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	H	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	Me	H

Me	Me	H	H	1	H	H	S	NHMe	Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	N(Me) ₂	Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	NHC(=O)Me	Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	NHC(=O)Ph	Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	NHSO ₂ Me	Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	NHSO ₂ Ph	Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	C(=O)OMe	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	C(=O)OEt	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	C(=O)OPh	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	CN	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	C(=O)NHMe	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	C(=O)Et	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	C(=O)Pr-i	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	C(=O)Pr	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	C(=O)CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	C(=NOMe)Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Ph	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Ph	C(=NOMe)Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	OMe	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	OEt	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	OPr-i	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	OPr-i	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	CN	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	C(=O)NHMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	C(=O)N(Me) ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	C(=O)Et	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	C(=O)Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	C(=O)Pr	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	C(=NOMe)Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	O	H	H	H
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	H	Cl
H	H	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	H	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	H	Me	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	1	Me	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	1	Et	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	1	Pr-i	H	S	Cl	Cl	Cl

Me	Me	H	H	1	Me	Me	S	Cl	Cl	Cl
Me	Et	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Et	Et	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Pr-i	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Pr	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Pr-c	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₂ -		H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₃ -		H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₄ -		H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₅ -		H	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₃ -	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₄ -	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	1	H	H	S	Cl	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	H	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	H	OMe	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	H	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	NHMe	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	N(Me) ₂	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	NHC(=O)Me	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	NHC(=O)Ph	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	NHSO ₂ Me	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	NHSO ₂ Ph	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	C(=O)OMe	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	C(=O)OEt	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	C(=O)OPh	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	CN	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	C(=O)NHMe	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	C(=O)Et	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	C(=O)Pr-i	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	C(=O)Pr	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	C(=O)CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	C(=NOMe)Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Ph	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Ph	C(=NOMe)Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	OMe	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	OEt	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	OPr-i	H

Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	OPr-i	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	CN	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	C(=O)NHMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	C(=O)N(Me) ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	C(=O)Et	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	C(=O)Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	C(=O)Pr	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	C(=NOMe)Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	O	H	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	H	Cl
H	H	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	H	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	H	Me	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	0	Me	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	0	Et	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	0	Pri	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Me	H	H	0	Me	Me	S	Cl	Cl	Cl
Me	Et	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Et	Et	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Pr-i	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Pr	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	Pr-c	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₂ -		H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₃ -		H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₄ -		H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
-(CH ₂) ₅ -		H	H	0	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₃ -	H	0	H	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₄ -	H	0	H	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	0	H	H	H	S	Cl	Cl	Cl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	0	H	H	H	S	Cl	Cl	Cl

表 3

R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	R ²⁹	R ²⁸	R ³⁰
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	H	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	H	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	H	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CHF ₂	H	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CHF ₂	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	H	F
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	H	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	H	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	H	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	H	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	H	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Me	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Me	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Me	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Et	Me	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	Me	Et
Me	Me	H	H	2	H	H	Et	Me	Cl

Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	Et
Me	Me	H	H	2	H	H	Et	Me	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Me	Et
Me	Me	H	H	2	H	H	Et	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	Et
Me	Me	H	H	2	H	H	Et	Me	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Me	Et
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Me	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	Me	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Me	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Me	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Me	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Me	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	Bu-t	Me	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	Me	Bu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	Bu-t	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	Bu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	Bu-t	Me	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Me	Bu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	Bu-t	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	Bu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	Bu-t	Me	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Me	Bu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	CH ₂ OMe	Me	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	Me	CH ₂ OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CH ₂ OMe	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	CH ₂ OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CH ₂ OMe	Me	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Me	CH ₂ OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CH ₂ OMe	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	CH ₂ OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CH ₂ OMe	Me	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Me	CH ₂ OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	Cl

Me	Me	H	H	2	H	H	CHF ₂	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Br
Me	Me	H	H	2	H	H	Br	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	I
Me	Me	H	H	2	H	H	I	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OH
Me	Me	H	H	2	H	H	OH	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OPri
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OPr
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OBu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OBu-s
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OBu-i
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OBu
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(2-Pen)
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-Pen)
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OPen-n
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(2-Hex)
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-Hex)

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OHex-n
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OPen-c
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OHex-c
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Bu-c
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Pen-c
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Hex-c
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH=CH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C≡CH
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCH ₂ CHF ₂	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)C(=O)OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(2-Cl)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(2-Br)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(2-F)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(2-Me)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(2-OMe)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(2-NO ₂)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(2-CN)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(2-C(=O)OMe)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-Cl)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-Br)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-F)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-Me)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-OMe)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-NO ₂)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-CN)Ph

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-C(=O)OMe)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(4-Cl)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(4-Br)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(4-F)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(4-Me)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(4-OMe)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(4-NO ₂)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(4-CN)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(4-C(=O)OMe)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)Et
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ Et
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Et
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SPr
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOPr
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Pr
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SPr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOPr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Pr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SBu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOBu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Bu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SCF ₃

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOCF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SPh
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOH
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOCH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOCH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SCH(Me)C(=O)OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOCH(Me)C(=O)OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH(Me)C(=O)OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOCH ₂ C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOCH ₂ C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SOCH ₂ C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	NH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	NHMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	NHSO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	N(Me)SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	NHPh
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	N(Me)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Me	CF ₃

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	C(=O)OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	C(=O)OPr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	C(=O)OCH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	C(=O)OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	C(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	C(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	C(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	C(=O)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Et
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Pr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Pr
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	CH ₂ OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₂ CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Me	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	Me	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Me	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	COOMe	Me	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	Me	COOMe
Me	Me	H	H	2	H	H	COOMe	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	COOMe
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Ph	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Ph	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Ph	Me	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	Ph	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Ph	Me	Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Et	OCHF ₂

Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Et	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Et	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Et	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Et	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Et	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Et	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Et	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Et	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Et	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Et	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Et	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Et	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Et	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Et	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Pri	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Pri	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Pri	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Pri	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Pri	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Pri	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Pri	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Pri	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Pri	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Pri	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Pri	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Pri	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pri	F

Me	Me	H	H	2	H	H	F	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pri	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pri	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pri	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pri	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pri	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pri	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Pr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Pr	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Pr	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Pr	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Pr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Pr	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Pr	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Pr	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Pr	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Pr	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Pr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Pr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr	Me

Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Bu-t	F
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Bu-t	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Bu-t	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Bu-t	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Bu-t	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Bu-t	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Bu-t	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-t	H
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-t	F
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-t	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-t	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-t	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-t	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-t	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-t	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-s	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Bu-s	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-i	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Bu-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Bu	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	1-Methylbutyl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	1-Methylbutyl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	1-Ethylpropyl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	1-Ethylpropyl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	1-Pentyl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	1-Pentyl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	1-Methylpentyl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	1-Methylpentyl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	2-Ethylbutyl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	2-Ethylbutyl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	3,3-Dimethylbutyl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	3,3-Dimethylbutyl	CF ₃

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	1-Hexyl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	1-Hexyl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	1-Heptyl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	1-Heptyl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	1-Octyl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	1-Octyl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr-c	F
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr-c	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr-c	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pen-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Hex-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ Pr-c	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OH
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OPr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OPr
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OBu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OCH ₂ Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OCH ₂ Bu-c
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OPen-c

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	1-cyclopropylethyl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	1-cyclopropylethyl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ (2-Methylcyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ (2-Methylcyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ (2,2-Dimethylcyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ (2,2-Dimethylcyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ (2-Chlorocyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ (2-Chlorocyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ (2,2-Dichlorocyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ (2,2-Dichlorocyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ (2-Fluorocyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ (2-Fluorocyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ (2,2-Difluorocyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ (2,2-Difluorocyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Bu-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pen-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Hex-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CHCl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH=CHCl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CH ₂ C≡CH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ C≡CH	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CCH	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ C≡CH	Cl

Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C≡CH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ C≡CH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CHMeC≡CH	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CHMeC≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C≡CMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CHF ₂	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CHF ₂	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Et	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CHF ₂	Et
Me	Me	H	H	2	H	H	Et	CHF ₂	Et
Me	Me	H	H	2	H	H	Pr-i	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CHF ₂	Pr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CHF ₂	Cl

Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CHF ₂	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CHF ₂	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CHF ₂	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ OH	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ OH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CH ₂ OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ OMe	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ OMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ OMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	F
Me	Me	H	H	2	H	H	F	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	CH ₂ OMe	CF ₃

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ OEt	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OH	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OEt	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ NHMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me) ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ N(Me) ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)C(=O)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)C(=O)CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)SO ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)SO ₂ CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)SO ₂ CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ SMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ SMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CN	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)OMe	CF ₃

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)OEt	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH(Me)C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH(Me)C(=O)OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(Me) ₂ C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	C(Me) ₂ C(=O)OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)NH ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)NHMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)N(Me) ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)N(Me) ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=NOMe)Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=NOMe)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ C(=O)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Ph	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Ph	F
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Ph	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	Et	Ph	F
Me	Me	H	H	2	H	H	Et	Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Et	Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	Et	Ph	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	Pr	Ph	F
Me	Me	H	H	2	H	H	Pr	Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Pr	Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	Pr	Ph	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Ph	F
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	Pri	Ph	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	Burt	Ph	Cl

Me	Me	H	H	2	H	H	CH ₂ OMe	Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CHF ₂	Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	H
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	Et
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	F
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OH
Me	Me	H	H	2	H	H	OH	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OPri
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OPr
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OBu ^t
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ Pr ^c
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ CH=CH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ C≡CH
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ C(=O)OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OCH(Me)C(=O)OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OC(Me) ₂ C(=O)OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)Et
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)CF ₃

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ Et
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SOMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SOEt
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Et
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SPr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SOPr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Pr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SPr
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SOPr
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Pr
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SBu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SOBu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Bu-t
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SOCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	NH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	NHMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	NHPh
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)OMe

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	Imidazol-1-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	Pyrazol-1-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	1,2,4-Triazol-1-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	1,2,4-Triazol-4-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	Tetrazol-1-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	Tetrazol-5-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	(4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl) oxy
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	(4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl) sulfonyl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₂ CF ₃	Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-Cl)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-F)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-NO ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-CN)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-C(=O)Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-C(=O)OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-C(=O)OEt)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-C(=O)OPr-i)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-C(=O)NH ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-C(=O)NHMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-C(=O)NMe ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-Cl)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-F)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-NO ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-CN)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-C(=O)Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-C(=O)OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-C(=O)OEt)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-C(=O)OPr-i)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-C(=O)NH ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-C(=O)NHMe)Ph	Cl

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-C(=O)NMe ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-Cl)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-F)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-NO ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-CN)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-C(=O)Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-C(=O)OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-C(=O)OEt)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-C(=O)OPr-i)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-C(=O)NH ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-C(=O)NHMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-C(=O)NMe ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pyrimidin-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Thiophen-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Furan-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	SO ₂ Et	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	SO ₂ Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	SO ₂ CH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	SO ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	SO ₂ CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	SO ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)Et	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)Bu-t	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)CH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)CH ₂ Cl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)CHCl ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)OPh	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)OCH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)NHMe	Cl

Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)N(Me) ₂	Cl	
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)NHPh	Cl	
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	NH ₂	Cl	
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	-(CH ₂) ₂ O-		
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl		-(CH ₂) ₃ O-	
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl		-(CH ₂) ₃ S-	
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl		-(CH ₂) ₃ SO ₂ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃		-(CH ₂) ₂ O-	
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃		-(CH ₂) ₃ O-	
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃		-(CH ₂) ₃ S-	
Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃		-(CH ₂) ₃ SO ₂ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe		-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂		-(CH ₂) ₄ -	
H	H	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	H	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	H	Me	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	Me	Me	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	Me	H	H	2	Me	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	Me	H	H	2	Et	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	Me	H	H	2	Pr-i	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	Me	H	H	2	Me	Me	CF ₃	Me	Cl	
Me	Et	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
Et	Et	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	Pr-i	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	Pr	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	Pr-c	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
-(CH ₂) ₂ -		H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
-(CH ₂) ₃ -		H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
-(CH ₂) ₄ -		H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
-(CH ₂) ₅ -		H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
H	-(CH ₂) ₃ -		H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
H	-(CH ₂) ₄ -		H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
H	-(CH ₂) ₅ -		H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
H	-(CH ₂) ₆ -		H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	H	Cl	
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	H	Cl	

Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CHF ₂	H	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	H	F
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	H	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	H	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	H	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	H	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	H	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Et	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Me	Et
Me	Me	H	H	1	H	H	Pri	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Me	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	Bu-t	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Me	Bu-t
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CHF ₂	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Me	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	F
Me	Me	H	H	1	H	H	F	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OH
Me	Me	H	H	1	H	H	OH	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	OEt	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OPri

Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OPr
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OBu ^t
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OBu ^s
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OBu ⁱ
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OBu
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(2-Pen)
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(3-Pen)
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OPen ⁿ
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(2-Hex)
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(3-Hex)
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OHex ⁿ
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OPen ^c
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OHex ^c
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Pr ^c
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Bu ^c
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Pen ^c
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Hex ^c
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH=CH ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C≡CH
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCH ₂ CHF ₂	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)C(=O)OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(2-Cl)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(2-Br)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(2-F)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(2-Me)Ph

Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(2-OMe)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(2-NO ₂)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(2-CN)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(2-C(=O)OMe)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(3-Cl)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(3-Br)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(3-F)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(3-Me)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(3-OMe)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(3-NO ₂)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(3-CN)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(3-C(=O)OMe)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(4-Cl)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(4-Br)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(4-F)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(4-Me)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(4-OMe)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(4-NO ₂)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(4-CN)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	O(4-C(=O)OMe)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)Et
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ Et
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SEt
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Et
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SPr
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Pr
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SPr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Pr-i

Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SBu-t
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Bu-t
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SCF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SPh
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SCH(Me)C(=O)OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH(Me)C(=O)OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	NH ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	NHMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	NHSO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	N(Me)SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	NHPh
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	N(Me)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CN	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	C(=O)OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	C(=O)OCH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	C(=O)OPh

Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	C(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	C(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	C(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	C(=O)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Et
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Pr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Pr
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	CH ₂ OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₂ CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Ph	Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Ph	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Ph	Me	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	Ph	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Ph	Me	Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Et	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Et	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Et	F
Me	Me	H	H	1	H	H	F	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Et	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Et	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Et	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	OEt	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Et	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CN	Et	CF ₃

Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Et	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Pri	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Pri	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Pri	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Pri	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pri	F
Me	Me	H	H	1	H	H	F	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pri	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pri	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pri	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	OEt	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pri	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pri	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CN	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pri	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Pr	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Pr	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Pr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Pr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pr	F
Me	Me	H	H	1	H	H	F	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pr	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pr	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pr	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	OEt	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pr	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CN	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pr	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	Pr	CF ₃

Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Bu-t	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Bu-t	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Bu-t	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Bu-t	H
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Bu-t	F
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Bu-t	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Bu-t	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Bu-t	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	OEt	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Bu-t	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Bu-t	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Bu-t	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Bu-s	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Bu-s	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Bu-i	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Bu-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Bu	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Bu	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	1-Methylbutyl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	1-Methylbutyl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	1-Ethylpropyl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	1-Ethylpropyl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	1-Pentyl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	1-Pentyl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	1-Methylpentyl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	1-Methylpentyl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	2-Ethylbutyl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	2-Ethylbutyl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	3,3-Dimethylbutyl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	3,3-Dimethylbutyl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	1-Hexyl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	1-Hexyl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	1-Heptyl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	1-Heptyl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	1-Octyl	Cl

Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	1-Octyl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pen-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Hex-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	F
Me	Me	H	H	1	H	H	F	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OH
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	OEt	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OPr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OPr
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OBu-t
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OCH ₂ Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OCH ₂ Bu-c
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OPen-c
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CN	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	1-cyclopropylethyl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	1-cyclopropylethyl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ (2-Methyl-cyclopropyl)	Cl

Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ (2-Methyl-cyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ (2,2-Dimethyl-cyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ (2,2-Dimethyl-cyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ (2-Chloro-cyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ (2-Chloro-cyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ (2,2-Dichloro-cyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ (2,2-Dichloro-cyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ (2-Fluoro-cyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ (2-Fluoro-cyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ (2,2-Difluoro-cyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ (2,2-Difluoro-cyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Bu-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Pen-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ Hex-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CHCl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CH=CHCl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C≡CH	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CH ₂ C≡CH	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C≡CH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CH ₂ C≡CH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	F
Me	Me	H	H	1	H	H	F	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	OEt	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	OCHF ₂

Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CN	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CHMeC≡CH	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CHMeC≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C≡CMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CHF ₂	F
Me	Me	H	H	1	H	H	F	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CHF ₂	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	OEt	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CHF ₂	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CN	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Et	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CHF ₂	Et
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ OH	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ OH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ OMe	Cl

Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CH ₂ OMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CH ₂ OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	F
Me	Me	H	H	1	H	H	F	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	OEt	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CN	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ OEt	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OH	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OEt	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ NHMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me) ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ N(Me) ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)C(=O)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)C(=O)CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)SO ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)SO ₂ CF ₃	Cl

Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)SO ₂ CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ SMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ SMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CN	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)OEt	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH(Me)C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH(Me)C(=O)OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(Me) ₂ C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	C(Me) ₂ C(=O)OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)NH ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)NHMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)N(Me) ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)N(Me) ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=NOMe)Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C(=NOMe)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ C(=O)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	Ph	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Et	Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Pr	Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Pr-i	Ph	Cl

Me	Me	H	H	1	H	H	Bu-t	Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CH ₂ OMe	Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CHF ₂	Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	H
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	Et
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	Pr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	F
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OH
Me	Me	H	H	1	H	H	OH	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	OEt	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OPr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OPr
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OBu-t
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ CH=CH ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ C≡CH
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ C(=O)OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OCH(Me)C(=O)OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OC(Me) ₂ C(=O)OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)Et
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)CH ₂ Ph

Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ Et
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SEt
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Et
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SPr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Pr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SPr
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Pr
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SBu-t
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Bu-t
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	NH ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	NHMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	NHPh
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	Imidazol-1-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	Pyrazol-1-yl

Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	1,2,4-Triazol-1-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	1,2,4-Triazol-4-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	Tetrazol-1-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	Tetrazol-5-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	(4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl) oxy
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Ph	(4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl) sulfonyl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₂ CF ₃	Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-Cl)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-F)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-NO ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-CN)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-C(=O)Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-C(=O)OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-C(=O)OEt)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-C(=O)OPr-i)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-C(=O)NH ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-C(=O)NHMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(2-C(=O)NMe ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-Cl)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-F)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-NO ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-CN)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-C(=O)Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-C(=O)OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-C(=O)OEt)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-C(=O)OPr-i)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-C(=O)NH ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-C(=O)NHMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(3-C(=O)NMe ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-Cl)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-F)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-Me)Ph	Cl

Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-NO ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-CN)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-C(=O)Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-C(=O)OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-C(=O)OEt)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-C(=O)OPr-i)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-C(=O)NH ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-C(=O)NHMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	(4-C(=O)NMe ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Pyrimidin-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Thiophen-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	Furan-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	SO ₂ Et	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	SO ₂ Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	SO ₂ CH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	SO ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	SO ₂ CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	SO ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)Et	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)Bu-t	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)CH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)CH ₂ Cl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)CHCl ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)OPh	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)OCH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)NHMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)N(Me) ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	C(=O)NHPh	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃	NH ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl		-(CH ₂) ₂ O-
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl		-(CH ₂) ₃ O-

Me	Me	H	H	1	H	H	Cl		-(CH ₂) ₃ S-
Me	Me	H	H	1	H	H	Cl		-(CH ₂) ₃ SO ₂ -
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃		-(CH ₂) ₂ O-
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃		-(CH ₂) ₃ O-
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃		-(CH ₂) ₃ S-
Me	Me	H	H	1	H	H	CF ₃		-(CH ₂) ₃ SO ₂ -
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe		-(CH ₂) ₄ -
Me	Me	H	H	1	H	H	OCHF ₂		-(CH ₂) ₄ -
H	H	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	H	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	H	Me	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	Me	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	Me	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	Et	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	Pri	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	Me	Me	CF ₃	Me	Cl
Me	Et	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
Et	Et	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Pri	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Pr	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Pr-c	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
	-(CH ₂) ₂ -	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
	-(CH ₂) ₃ -	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
	-(CH ₂) ₄ -	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
	-(CH ₂) ₅ -	H	H	1	H	H	CF ₃	Me	Cl
H	-(CH ₂) ₃ -	H	1	H	H	H	CF ₃	Me	Cl
H	-(CH ₂) ₄ -	H	1	H	H	H	CF ₃	Me	Cl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	1	H	H	H	CF ₃	Me	Cl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	1	H	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	H	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	H	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CHF ₂	H	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	H	F
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	H	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	H	OMe

Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	H	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	H	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	H	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Et	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Me	Et
Me	Me	H	H	0	H	H	Pr-i	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Me	Pr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	Bu-t	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Me	Bu-t
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CHF ₂	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Me	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	F
Me	Me	H	H	0	H	H	F	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OH
Me	Me	H	H	0	H	H	OH	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	OEt	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OPr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OPr
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OBu-t
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OBu-s
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OBu-i
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OBu

Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(2-Pen)
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(3-Pen)
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OPen-n
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(2-Hex)
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(3-Hex)
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OHex-n
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OPen-c
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OHex-c
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Bu-c
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Pen-c
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Hex-c
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH=CH ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C*CH
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCH ₂ CHF ₂	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)C(=O)OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(2-Cl)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(2-Br)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(2-F)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(2-Me)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(2-OMe)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(2-NO ₂)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(2-CN)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(2-C(=O)OMe)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(3-Cl)Ph

Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(3-Br)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(3-F)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(3-Me)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(3-OMe)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(3-NO ₂)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(3-CN)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(3-C(=O)OMe)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(4-Cl)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(4-Br)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(4-F)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(4-Me)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(4-OMe)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(4-NO ₂)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(4-CN)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(4-C(=O)OMe)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)Et
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ Et
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OSO ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SEt
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Et
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SPr
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Pr
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SPr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Pr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SBu-t
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Bu-t
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SCF ₃

Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SPh
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SCH(Me)C(=O)OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH(Me)C(=O)OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SCH ₂ C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ CH ₂ C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	NH ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	NHMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	NHSO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	N(Me)SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	NHPh
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	N(Me)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CN	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	C(=O)OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	C(=O)OCH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	C(=O)OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	C(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	C(=O)CF ₃

Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	C(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	C(=O)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Et
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Pr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Pr
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	CH ₂ OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₂ CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Ph	Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Ph	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Ph	Me	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	Ph	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Ph	Me	Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Et	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Et	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Et	F
Me	Me	H	H	0	H	H	F	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Et	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Et	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Et	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	OEt	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Et	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CN	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Et	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Pr-i	OCHF ₂

Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Pri	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pri	F
Me	Me	H	H	0	H	H	F	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pri	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pri	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pri	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	OEt	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pri	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pri	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CN	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pri	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Pr	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Pr	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Pr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Pr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pr	F
Me	Me	H	H	0	H	H	F	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pr	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pr	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pr	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	OEt	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pr	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CN	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pr	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Pr	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	But	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	But	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	But	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	But	H
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	But	F

Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Bu-t	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Bu-t	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Bu-t	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	OEt	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Bu-t	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Bu-t	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Bu-t	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Bu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Bu-s	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Bu-s	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Bu-i	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Bu-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Bu	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Bu	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	1-Methylbutyl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	1-Methylbutyl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	1-Ethylpropyl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	1-Ethylpropyl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	1-Pentyl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	1-Pentyl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	1-Methylpentyl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	1-Methylpentyl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	2-Ethylbutyl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	2-Ethylbutyl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	3,3-Dimethylbutyl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	3,3-Dimethylbutyl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	1-Hexyl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	1-Hexyl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	1-Heptyl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	1-Heptyl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	1-Octyl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	1-Octyl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pen-c	Cl

Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Hex-c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	F
Me	Me	H	H	0	H	H	F	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OH
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	OEt	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OPri
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OPr
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OBu-t
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OCH ₂ Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OCH ₂ Bu-c
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OPen-c
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CN	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	CH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	1-cyclopropylethyl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	1-cyclopropylethyl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ (2-Methyl-cyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ (2-Methyl-cyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ (2,2-Dimethyl-cyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ (2,2-Dimethyl-cyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ (2-Chloro-cyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ (2-Chloro-cyclopropyl)	CF ₃

Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ (2,2-Dichloro-cyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ (2,2-Dichloro-cyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ (2-Fluoro-cyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ (2-Fluoro-cyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ (2,2-Difluoro-cyclopropyl)	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ (2,2-Difluoro-cyclopropyl)	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Bu ^c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ Bu ^c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Pen ^c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ Pen ^c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ Hex ^c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ Hex ^c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ Pr ^c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ Pr ^c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CHCl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CH=CHCl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C≡CH	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CH ₂ C≡CH	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C≡CH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CH ₂ C≡CH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	F
Me	Me	H	H	0	H	H	F	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	OEt	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CN	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	Cl

Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C≡CH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C≡CMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CHF ₂	F
Me	Me	H	H	0	H	H	F	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CHF ₂	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	OEt	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CHF ₂	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CN	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Et	CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CHF ₂	Et
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ OH	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ OH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ OMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CH ₂ OMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CH ₂ OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	F
Me	Me	H	H	0	H	H	F	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl

Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	OEt	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CN	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ OEt	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OH	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OEt	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ NHMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me) ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ N(Me) ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)C(=O)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)C(=O)CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)SO ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ N(Me)SO ₂ CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ N(Me)SO ₂ CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ SMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ SMe	Cl

Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CN	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)OEt	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH(Me)C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH(Me)C(=O)OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(Me) ₂ C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	C(Me) ₂ C(=O)OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)NH ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)NHMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)N(Me) ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)N(Me) ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=NOMe)Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C(=NOMe)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ C(=O)Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Ph	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Et	Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Pr	Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Pr-i	Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Bu-t	Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CH ₂ OMe	Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CHF ₂	Ph	Cl

Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	H
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	Et
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	Pr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	F
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OH
Me	Me	H	H	0	H	H	OH	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	OEt	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OPr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OPr
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OBu-t
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ CH=CH ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ C≡CH
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂	Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OCH ₂ C(=O)OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OCH(Me)C(=O)OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OC(Me) ₂ C(=O)OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)Et
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OC(=O)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ Et
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ CF ₃

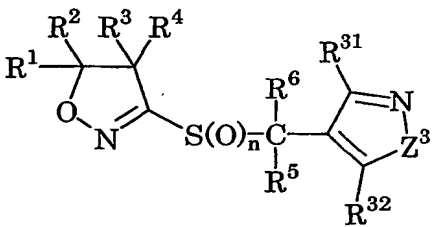
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	OSO ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SEt
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Et
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SPr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Pr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SPr
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Pr
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SBu-t
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Bu-t
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	NH ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	NHMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	NHPh
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	N(Me)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)NH ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)NHMe
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	C(=O)N(Me) ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	Imidazol-1-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	Pyrazol-1-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	1,2,4-Triazol-1-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	1,2,4-Triazol-4-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	Tetrazol-1-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	Tetrazol-5-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	(4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl) oxy

Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	(4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl)
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₂ CF ₃	Ph	sulfonyl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-Cl)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-F)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-NO ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-CN)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-C(=O)Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-C(=O)OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-C(=O)OEt)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-C(=O)OPr-i)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-C(=O)NH ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-C(=O)NHMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(2-C(=O)NMe ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-Cl)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-F)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-NO ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-CN)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-C(=O)Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-C(=O)OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-C(=O)OEt)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-C(=O)OPr-i)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-C(=O)NH ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-C(=O)NHMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(3-C(=O)NMe ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-Cl)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-F)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-NO ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-CN)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-C(=O)Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-C(=O)OMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-C(=O)OEt)Ph	Cl

Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-C(=O)OPr-i)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-C(=O)NH ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-C(=O)NHMe)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	(4-C(=O)NMe ₂)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Pyrimidin-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Thiophen-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Furan-2-yl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	SO ₂ Et	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	SO ₂ Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	SO ₂ CH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	SO ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	SO ₂ CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	SO ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)Et	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)Bu-t	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)CH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)CH ₂ Cl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)CHCl ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)OMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)OPh	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)OCH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)NHMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)N(Me) ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	C(=O)NHPh	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	NH ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	-(CH ₂) ₂ O-	
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	-(CH ₂) ₃ O-	
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	-(CH ₂) ₃ S-	
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	-(CH ₂) ₃ SO ₂ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	-(CH ₂) ₂ O-	
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	-(CH ₂) ₃ O-	
Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	-(CH ₂) ₃ S-	

Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃		-(CH ₂) ₃ SO ₂ -
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe		-(CH ₂) ₄ -
Me	Me	H	H	0	H	H	OCHF ₂		-(CH ₂) ₄ -
H	H	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	H	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	H	Me	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	Me	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	Me	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	Et	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	Pr-i	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	Me	Me	CF ₃	Me	Cl
Me	Et	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
Et	Et	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Pr-i	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Pr	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Pr-c	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
	-(CH ₂) ₂ -	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
	-(CH ₂) ₃ -	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
	-(CH ₂) ₄ -	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
	-(CH ₂) ₅ -	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	Cl
H	-(CH ₂) ₃ -	H	0	H	H	H	CF ₃	Me	Cl
H	-(CH ₂) ₄ -	H	0	H	H	H	CF ₃	Me	Cl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	0	H	H	H	CF ₃	Me	Cl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	0	H	H	H	CF ₃	Me	Cl
Me	Et	H	H	2	H	H	H	H	H

表 4

									
R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Z ³	R ³¹	R ³²
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	F
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	OPr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	O	OCHF ₂	F
Me	Me	H	H	2	H	H	O	OCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	O	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	O	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	O	OCHF ₂	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	F
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	OPr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SMe
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SOMe
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SEt
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SOEt
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Et
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SPr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SOPr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Pr-i
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SPh
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SOPh

Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SOCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SCF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SOCF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	NH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	NHMe
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	NHPh
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	N(Me)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Ph	Me
H	H	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
Me	H	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
Me	H	Me	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	Me	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	Me	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	Et	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	Pri	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	Me	Me	O	CF ₃	Me
Me	Et	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
Et	Et	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Pri	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me

Me	Pr	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Pr ^c	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
Me	CH ₂ Pr ^c	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
-(CH ₂) ₂ -		H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
-(CH ₂) ₃ -		H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
-(CH ₂) ₄ -		H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
-(CH ₂) ₅ -		H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₃ -	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₄ -	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₅ -	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₆ -	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	F
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	OE _t
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	OP _{r-i}
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	OP _h
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	F
Me	Me	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	S	OCHF ₂	CN
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	F
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	OE _t
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	OP _h
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SMe
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SOMe
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SE _t
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SOE _t
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SO ₂ E _t
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SP _{r-i}
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SOP _{r-i}
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SO ₂ P _{r-i}
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SPh
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SOP _h
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SCHF ₂

Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SOCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SCF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SOCF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	NH ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	NHMe
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	NHPh
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	N(Me)Ph
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	CF ₃	CN
H	H	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	H	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	H	Me	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	Me	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	Me	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	Et	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	Pri	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	2	Me	Me	S	CF ₃	Cl
Me	Et	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
Et	Et	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Pri	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Pr	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Pr-c	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl

	-(CH ₂) ₂ -	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
	-(CH ₂) ₃ -	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
	-(CH ₂) ₄ -	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
	-(CH ₂) ₅ -	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₃ -	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₄ -	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	H	2	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	F
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	OPr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	O	OCHF ₂	F
Me	Me	H	H	1	H	H	O	OCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	O	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	O	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	O	OCHF ₂	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	F
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	OPr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SMe
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SEt
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Et
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SPr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Pr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SPh
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SCF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	SO ₂ CF ₃

Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	NH ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	NHMe
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	NHPh
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	N(Me)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	O	CF ₃	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Ph	Me
H	H	H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
Me	H	H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
Me	H	Me	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	Me	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	Me	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	Et	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	Pr-i	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	Me	Me	O	CF ₃	Me
Me	Et	H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
Et	Et	H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Pr-i	H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Pr	H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Pr-c	H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
-(CH ₂) ₂ -		H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
-(CH ₂) ₃ -		H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
-(CH ₂) ₄ -		H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me

	-(CH ₂) ₅ -	H	H	1	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₃ -		H	1	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₄ -		H	1	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₅ -		H	1	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₆ -		H	1	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	F
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	OPr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	F
Me	Me	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	S	OCHF ₂	CN
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	F
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SMe
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SEt
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SO ₂ Et
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SPr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SO ₂ Pr-i
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SPh
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SCF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	NH ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ Ph

Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	NHMe
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	NHPh
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	N(Me)Ph
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	CF ₃	CN
H	H	H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	H	H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	H	Me	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	Me	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	Me	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	Et	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	Pri	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	1	Me	Me	S	CF ₃	Cl
Me	Et	H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
Et	Et	H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Pri	H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Pr	H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Pr-c	H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
-(CH ₂) ₂ -		H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
-(CH ₂) ₃ -		H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
-(CH ₂) ₄ -		H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
-(CH ₂) ₅ -		H	H	1	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₃ -	H	1	H	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₄ -	H	1	H	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	1	H	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	1	H	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	F
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	OEt

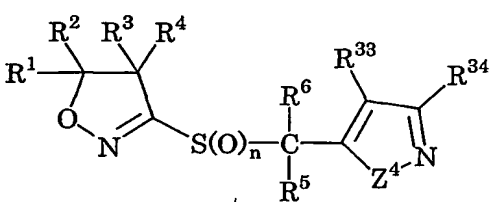
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	OPr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	O	OCHF ₂	F
Me	Me	H	H	0	H	H	O	OCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	O	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	O	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	O	OCHF ₂	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	F
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	OPr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SMe
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SEt
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Et
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SPr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Pr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SPh
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SCF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	NH ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	NHC(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	NHMe
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	NHPh
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)Ph

Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	N(Me)C(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	N(Me)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Ph	Me
H	H	H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
Me	H	H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
Me	H	Me	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	Me	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	Me	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	Et	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	Pr-i	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	Me	Me	O	CF ₃	Me
Me	Et	H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
Et	Et	H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Pr-i	H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Pr	H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Pr-c	H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
-(CH ₂) ₂ -		H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
-(CH ₂) ₃ -		H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
-(CH ₂) ₄ -		H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
-(CH ₂) ₅ -		H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₃ -	H	0	H	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₄ -	H	0	H	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₅ -	H	0	H	H	H	O	CF ₃	Me
H	-(CH ₂) ₆ -	H	0	H	H	H	O	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	F
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	OPr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	F

Me	Me	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	S	OCHF ₂	CN
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	F
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SMe
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SEt
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SO ₂ Et
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SPr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SO ₂ Pr-i
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SPh
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SCF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	NH ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	NHC(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	NHSO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	NHMe
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	NHPh
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)CH ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	N(Me)C(=O)CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ Ph
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	N(Me)SO ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	N(Me) ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	N(Me)Ph

Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	CF ₃	CN
H	H	H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	H	H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	H	Me	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	Me	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	Me	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	Et	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	Pr-i	H	S	CF ₃	Cl
Me	Me	H	H	0	Me	Me	S	CF ₃	Cl
Me	Et	H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
Et	Et	H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Pr-i	H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Pr	H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	Pr-c	H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
-(CH ₂) ₂ -		H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
-(CH ₂) ₃ -		H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
-(CH ₂) ₄ -		H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
-(CH ₂) ₅ -		H	H	0	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₃ -	H	0	H	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₄ -	H	0	H	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	0	H	H	H	S	CF ₃	Cl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	0	H	H	H	S	CF ₃	Cl

表 5

									
R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Z ⁴	R ³³	R ³⁴
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	Cl	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	Cl	Et
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	C(=O)Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NEt	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NEt	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NEt	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NEt	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NEt	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NEt	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NEt	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr-i	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr-i	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr-i	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr-i	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr-i	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr-i	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr-i	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr	OCHF ₂	Me

Me	Me	H	H	2	H	H	NPr	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NBu-t	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NBu-t	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NBu-t	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NBu-t	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NBu-t	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NBu-t	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NBu-t	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ OMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ OMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ OMe	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ C≡CH	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ C≡CH	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ C≡CH	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ CH=CH ₂	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NCH ₂ CH=CH ₂	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂	C(=O)Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OMe	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OEt	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OCH ₂ CF ₃	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OCH ₂ CH=CH ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OCH ₂ C≡CH	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(2-Cl)Ph	Cl	Me

Me	Me	H	H	2	H	H	N(2-F)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(2-OMe)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(2-Me)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(3-Cl)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(3-F)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(3-OMe)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(3-Me)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(4-Cl)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(4-F)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(4-OMe)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(4-Me)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(Thiophen-2-yl)	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	N(Thiophen-2-yl)	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	N(Thiophen-2-yl)	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)Me	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)Me	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)Me	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)CF ₃	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)CF ₃	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)CF ₃	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)CH ₂ Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)CH ₂ Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)CH ₂ Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)OMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)OMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)OMe	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)OCH ₂ Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)OCH ₂ Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)OCH ₂ Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)OPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)OPh	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)OPh	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)NHMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)NHMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)NHMe	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)N(Me) ₂	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)N(Me) ₂	CF ₃	H
Me	Me	H	H	2	H	H	NC(=O)N(Me) ₂	OCHF ₂	H
H	H	H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
Me	H	H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me

Me	H	Me	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	Me	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	Et	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	Pr-i	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	Me	Me	NPh	Cl	Me
Me	Et	H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
Et	Et	H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Pr-i	H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Pr	H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Pr-c	H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
-(CH ₂) ₂ -		H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
-(CH ₂) ₃ -		H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
-(CH ₂) ₄ -		H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
-(CH ₂) ₅ -		H	H	2	H	H	NPh	Cl	Me
H	-(CH ₂) ₃ -	H	2	H	H	NPh	Cl	Me	Me
H	-(CH ₂) ₄ -	H	2	H	H	NPh	Cl	Me	Me
H	-(CH ₂) ₅ -	H	2	H	H	NPh	Cl	Me	Me
H	-(CH ₂) ₆ -	H	2	H	H	NPh	Cl	Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	O	H	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	H	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	Cl	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	Cl	Et
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	C(=O)Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NEt	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NEt	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NEt	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NEt	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NEt	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NEt	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NEt	-(CH ₂) ₄ -	

Me	Me	H	H	1	H	H	NPr-i	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr-i	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr-i	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr-i	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr-i	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr-i	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr-i	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NBu-t	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NBu-t	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NBu-t	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NBu-t	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NBu-t	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NBu-t	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NBu-t	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ OMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ OMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ OMe	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ C≡CH	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ C≡CH	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ C≡CH	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ CH=CH ₂	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NCH ₂ CH=CH ₂	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NCHF ₂	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NCHF ₂	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NCHF ₂	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NCHF ₂	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NCHF ₂	OCHF ₂	Me

Me	Me	H	H	1	H	H	NCHF ₂	C(=O)Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NCHF ₂	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	OMe	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	OEt	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	OCH ₂ CF ₃	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	OCH ₂ CH=CH ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	OCH ₂ C≡CH	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(2-Cl)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(2-F)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(2-OMe)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(2-Me)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(3-Cl)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(3-F)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(3-OMe)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(3-Me)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(4-Cl)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(4-F)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(4-OMe)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(4-Me)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(Thiophen-2-yl)	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	N(Thiophen-2-yl)	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	N(Thiophen-2-yl)	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)Me	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)Me	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)Me	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)CF ₃	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)CF ₃	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)CF ₃	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)CH ₂ Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)CH ₂ Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)CH ₂ Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)OMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)OMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)OMe	OCHF ₂	H

Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)OCH ₂ Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)OCH ₂ Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)OCH ₂ Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)OPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)OPh	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)OPh	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)NHMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)NHMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)NHMe	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)N(Me) ₂	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)N(Me) ₂	CF ₃	H
Me	Me	H	H	1	H	H	NC(=O)N(Me) ₂	OCHF ₂	H
H	H	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
Me	H	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
Me	H	Me	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	Me	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	Et	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	Pr-i	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	Me	Me	NPh	Cl	Me
Me	Et	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
Et	Et	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Pr-i	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Pr	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Pr-c	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
-(CH ₂) ₂ -		H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
-(CH ₂) ₃ -		H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
-(CH ₂) ₄ -		H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
-(CH ₂) ₅ -		H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
H	-(CH ₂) ₃ -	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
H	-(CH ₂) ₄ -	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
H	-(CH ₂) ₅ -	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
H	-(CH ₂) ₆ -	H	H	1	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	O	H	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	O	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	H	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	Cl	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	Cl	Et
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	CF ₃	Me

Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	C(=O)Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NEt	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NEt	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NEt	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NEt	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NEt	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NEt	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NEt	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr-i	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr-i	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr-i	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr-i	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr-i	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr-i	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr-i	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NBu-t	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NBu-t	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NBu-t	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NBu-t	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NBu-t	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NBu-t	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NBu-t	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ OMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ OMe	CF ₃	H

Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ OMe	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ C≡CH	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ C≡CH	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ C≡CH	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ CH=CH ₂	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NCH ₂ CH=CH ₂	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	C(=O)Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	C(=O)Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	OMe	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	OE _t	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	OCH ₂ CF ₃	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	OCH ₂ CH=CH ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	OCH ₂ C≡CH	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(2-Cl)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(2-F)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(2-OMe)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(2-Me)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(3-Cl)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(3-F)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(3-OMe)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(3-Me)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(4-Cl)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(4-F)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(4-OMe)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(4-Me)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(Thiophen-2-yl)	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	N(Thiophen-2-yl)	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	N(Thiophen-2-yl)	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)Me	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)Me	CF ₃	H

Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)Me	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)CF ₃	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)CF ₃	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)CF ₃	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)CH ₂ Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)CH ₂ Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)CH ₂ Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)OMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)OMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)OMe	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)OCH ₂ Ph	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)OCH ₂ Ph	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)OCH ₂ Ph	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)OPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)OPh	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)OPh	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)NHMe	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)NHMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)NHMe	OCHF ₂	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)N(Me) ₂	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)N(Me) ₂	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	NC(=O)N(Me) ₂	OCHF ₂	H
H	H	H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
Me	H	H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
Me	H	Me	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	Me	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	Et	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	Pr-i	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	Me	Me	NPh	Cl	Me
Me	Et	H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
Et	Et	H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Pr-i	H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Pr	H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Pr-c	H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
-(CH ₂) ₂ -		H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
-(CH ₂) ₃ -		H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
-(CH ₂) ₄ -		H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me

	-(CH ₂) ₅ -	H	H	0	H	H	NPh	Cl	Me
H	-(CH ₂) ₃ -		H	0	H	H	NPh	Cl	Me
H	-(CH ₂) ₄ -		H	0	H	H	NPh	Cl	Me
H	-(CH ₂) ₅ -		H	0	H	H	NPh	Cl	Me
H	-(CH ₂) ₆ -		H	0	H	H	NPh	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	O	H	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	H	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Cl	Me
Me	Et	H	H	2	H	H	NH	H	H

表 6

R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Z ⁵	R ³⁵	R ³⁶
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	H	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	H	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe	H	OCH ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe		-(CH ₂) ₃ -
Me	Me	H	H	2	H	H	NMe		-(CH ₂) ₄ -
Me	Me	H	H	2	H	H	NEt		-(CH ₂) ₃ -
Me	Me	H	H	2	H	H	NEt		-(CH ₂) ₄ -
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr-i		-(CH ₂) ₃ -
Me	Me	H	H	2	H	H	NPr-i		-(CH ₂) ₄ -
Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂		-(CH ₂) ₃ -
Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂		-(CH ₂) ₄ -
Me	Me	H	H	2	H	H	N(CH ₂) ₃ O-		H
Me	Me	H	H	2	H	H	N(CH ₂) ₄ O-		H
Me	Me	H	H	2	H	H	N(CH ₂) ₄ -		H
Me	Me	H	H	2	H	H	N(CH ₂) ₅ -		H
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	H	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	H	OEt
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	H	OCH ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	H
Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	H

H	H	H	H	2	H	H	NPh	H	OMe
Me	H	H	H	2	H	H	NPh	H	OEt
Me	H	Me	H	2	H	H	NPh	H	OMe
Me	Me	H	H	2	Me	H	NPh	H	OEt
Me	Me	H	H	2	Et	H	NPh	H	OMe
Me	Me	H	H	2	Pr-i	H	NPh	H	OEt
Me	Me	H	H	2	Me	Me	NPh	H	OMe
Me	Et	H	H	2	H	H	NPh	H	OEt
Et	Et	H	H	2	H	H	NPh	H	OMe
Me	Pr-i	H	H	2	H	H	NPh	H	OEt
Me	Pr	H	H	2	H	H	NPh	H	OMe
Me	Pr-c	H	H	2	H	H	NPh	H	OEt
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	2	H	H	NPh	H	OMe
-(CH ₂) ₂ -		H	H	2	H	H	NPh	H	OEt
-(CH ₂) ₃ -		H	H	2	H	H	NPh	H	OMe
-(CH ₂) ₄ -		H	H	2	H	H	NPh	H	OEt
-(CH ₂) ₅ -		H	H	2	H	H	NPh	H	OMe
H	-(CH ₂) ₃ -	H	2	H	H	H	NPh	H	OEt
H	-(CH ₂) ₄ -	H	2	H	H	H	NPh	H	OMe
H	-(CH ₂) ₅ -	H	2	H	H	H	NPh	H	OMe
H	-(CH ₂) ₆ -	H	2	H	H	H	NPh	H	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	H	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	H	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	H	OCH ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NMe	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NEt	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NEt	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr-i	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NPr-i	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	1	H	H	N(CH ₂) ₃ O-		H
Me	Me	H	H	1	H	H	N(CH ₂) ₄ O-		H
Me	Me	H	H	1	H	H	N(CH ₂) ₄ -		H
Me	Me	H	H	1	H	H	N(CH ₂) ₅ -		H
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	H	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	H	OEt
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	H	OCH ₂ CF ₃

Me	Me	H	H	1	H	H	O	Me	H
Me	Me	H	H	1	H	H	S	Me	H
H	H	H	H	1	H	H	NPh	H	OMe
Me	H	H	H	1	H	H	NPh	H	OEt
Me	H	Me	H	1	H	H	NPh	H	OMe
Me	Me	H	H	1	Me	H	NPh	H	OEt
Me	Me	H	H	1	Et	H	NPh	H	OMe
Me	Me	H	H	1	Pr-i	H	NPh	H	OEt
Me	Me	H	H	1	Me	Me	NPh	H	OMe
Me	Et	H	H	1	H	H	NPh	H	OEt
Et	Et	H	H	1	H	H	NPh	H	OMe
Me	Pr-i	H	H	1	H	H	NPh	H	OEt
Me	Pr	H	H	1	H	H	NPh	H	OMe
Me	Pr-c	H	H	1	H	H	NPh	H	OEt
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	1	H	H	NPh	H	OMe
-(CH ₂) ₂ -		H	H	1	H	H	NPh	H	OEt
-(CH ₂) ₃ -		H	H	1	H	H	NPh	H	OMe
-(CH ₂) ₄ -		H	H	1	H	H	NPh	H	OEt
-(CH ₂) ₅ -		H	H	1	H	H	NPh	H	OMe
H	-(CH ₂) ₃ -	H	1	H	H	H	NPh	H	OEt
H	-(CH ₂) ₄ -	H	1	H	H	H	NPh	H	OMe
H	-(CH ₂) ₅ -	H	1	H	H	H	NPh	H	OMe
H	-(CH ₂) ₆ -	H	1	H	H	H	NPh	H	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	H	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	H	OEt
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	H	OCH ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NMe	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NEt	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NEt	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr-i	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NPr-i	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₃ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₄ -	
Me	Me	H	H	0	H	H	N(CH ₂) ₃ O-		H
Me	Me	H	H	0	H	H	N(CH ₂) ₄ O-		H
Me	Me	H	H	0	H	H	N(CH ₂) ₄ -		H
Me	Me	H	H	0	H	H	N(CH ₂) ₅ -		H
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	H	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	H	OEt

Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	H	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	NPh	H	OCH ₂ CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	O	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	H
H	H	H	H	0	H	H	NPh	H	OMe
Me	H	H	H	0	H	H	NPh	H	OEt
Me	H	Me	H	0	H	H	NPh	H	OMe
Me	Me	H	H	0	Me	H	NPh	H	OEt
Me	Me	H	H	0	Et	H	NPh	H	OMe
Me	Me	H	H	0	Pr-i	H	NPh	H	OEt
Me	Me	H	H	0	Me	Me	NPh	H	OMe
Me	Et	H	H	0	H	H	NPh	H	OEt
Et	Et	H	H	0	H	H	NPh	H	OMe
Me	Pr-i	H	H	0	H	H	NPh	H	OEt
Me	Pr	H	H	0	H	H	NPh	H	OMe
Me	Pr-c	H	H	0	H	H	NPh	H	OEt
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	0	H	H	NPh	H	OMe
-(CH ₂) ₂ -		H	H	0	H	H	NPh	H	OEt
-(CH ₂) ₃ -		H	H	0	H	H	NPh	H	OMe
-(CH ₂) ₄ -		H	H	0	H	H	NPh	H	OEt
-(CH ₂) ₅ -		H	H	0	H	H	NPh	H	OMe
H	-(CH ₂) ₃ -	H	0	H	H	H	NPh	H	OEt
H	-(CH ₂) ₄ -	H	0	H	H	H	NPh	H	OMe
H	-(CH ₂) ₅ -	H	0	H	H	H	NPh	H	OMe
H	-(CH ₂) ₆ -	H	0	H	H	H	NPh	H	OEt
Me	Et	H	H	2	H	H	O	H	H
Me	Et	H	H	2	H	H	S	H	H
Me	Et	H	H	2	H	H	NH	H	H

表 7

R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	R ³⁷	R ³⁸	R ³⁹	R ⁴⁰	
Me	Me	H	H	2	H	H	H	H	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	H	H	H	H	N-oxide
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Ph	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Ph	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Me	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	N-oxide
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	CN	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Me	H	H	N-oxide
Me	Me	H	H	2	H	H	Ph	Ph	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	(4-Cl)Ph	H	Me	-
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	(4-Cl)Ph	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Cl	H	H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	(CH ₂) ₃		H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	(CH ₂) ₃		H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	(CH ₂) ₄		H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	(CH ₂) ₄		H	-
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	H	(CH ₂) ₃		-
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	H	(CH ₂) ₃		-
Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	H	(CH ₂) ₄		-
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	H	(CH ₂) ₄		-
H	H	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	H	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	H	Me	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	Me	Me	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	2	Me	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	2	Et	H	H	CF ₃	H	H	-

Me	Me	H	H	2	Pr-i	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	2	Me	Me	H	CF ₃	H	H	-
Me	Et	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
Et	Et	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	Pr-i	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	Pr	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	Pr-c	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
-(CH ₂) ₂ -		H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
-(CH ₂) ₃ -		H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
-(CH ₂) ₄ -		H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
-(CH ₂) ₅ -		H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-
H	-(CH ₂) ₃ -	H	2	H	H	H	H	CF ₃	H	H	-
H	-(CH ₂) ₄ -	H	2	H	H	H	H	CF ₃	H	H	-
H	-(CH ₂) ₅ -	H	2	H	H	H	H	CF ₃	H	H	-
H	-(CH ₂) ₆ -	H	2	H	H	H	H	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	H	H	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	H	H	H	N-oxide
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	Ph	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	Ph	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	Me	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	Me	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	H	CF ₃	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	CF ₃	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	CN	CF ₃	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Me	Me	H	N-oxide
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Ph	Ph	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	(4-Cl)Ph	H	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	(4-Cl)Ph	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	Cl	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	(CH ₂) ₃	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Me	(CH ₂) ₃	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	(CH ₂) ₄	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Me	(CH ₂) ₄	H	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	H	(CH ₂) ₃	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Me	H	(CH ₂) ₃	-
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	H	(CH ₂) ₄	-

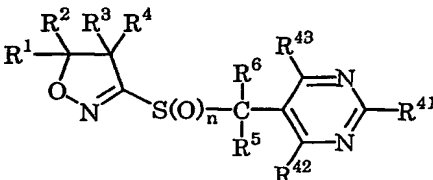
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	H	(CH ₂) ₄	-
H	H	H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
Me	H	H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
Me	H	Me	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
Me	Me	Me	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
Me	Me	H	H	1	Me	H	H	CF ₃	H	H
Me	Me	H	H	1	Et	H	H	CF ₃	H	H
Me	Me	H	H	1	Pr-i	H	H	CF ₃	H	H
Me	Me	H	H	1	Me	Me	H	CF ₃	H	H
Me	Et	H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
Et	Et	H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
Me	Pr-i	H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
Me	Pr	H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
Me	Pr-c	H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
-(CH ₂) ₂ -		H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
-(CH ₂) ₃ -		H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
-(CH ₂) ₄ -		H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
-(CH ₂) ₅ -		H	H	1	H	H	H	CF ₃	H	H
H	-(CH ₂) ₃ -	H	1	H	H	H	H	CF ₃	H	H
H	-(CH ₂) ₄ -	H	1	H	H	H	H	CF ₃	H	H
H	-(CH ₂) ₅ -	H	1	H	H	H	H	CF ₃	H	H
H	-(CH ₂) ₆ -	H	1	H	H	H	H	CF ₃	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	H	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	H	H	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Cl	Ph	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	Ph	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Cl	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	H	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Cl	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	CN	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Me	Me	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Ph	Ph	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Cl	(4-Cl)Ph	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Cl	(4-Cl)Ph	H
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	Cl	H

N-oxide

N-oxide

Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	(CH ₂) ₃	H	-		
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	(CH ₂) ₃	H	-		
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	(CH ₂) ₄	H	-		
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	(CH ₂) ₄	H	-		
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	H	(CH ₂) ₃	-		
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	H	(CH ₂) ₃	-		
Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	H	(CH ₂) ₄	-		
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	H	(CH ₂) ₄	-		
Me	Me	H	H	0	H	H	(2-Chloropyridin-3-yl)methylthio	H	H	H	-	
H	H	H	H	0	H	H		H	CF ₃	H	H	-
Me	H	H	H	0	H	H		H	CF ₃	H	H	-
Me	Me	Me	H	0	H	H		H	CF ₃	H	H	-
Me	H	Me	H	0	H	H		H	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	0	Me	H		H	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	0	Et	H		H	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	0	Pr-i	H		H	CF ₃	H	H	-
Me	Me	H	H	0	Me	Me		H	CF ₃	H	H	-
Me	Et	H	H	0	H	H		H	CF ₃	H	H	-
Et	Et	H	H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
Me	Pr-i	H	H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
Me	Pr	H	H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
Me	Pr-c	H	H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
-(CH ₂) ₂ -		H	H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
-(CH ₂) ₃ -		H	H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
-(CH ₂) ₄ -		H	H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
-(CH ₂) ₅ -		H	H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
H	-(CH ₂) ₃ -		H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
H	-(CH ₂) ₄ -		H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
H	-(CH ₂) ₅ -		H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
H	-(CH ₂) ₆ -		H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
Me	Et	H	H	2	H	H	H	H	H	H	-	

表 8

									
R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	R ⁴¹	R ⁴²	R ⁴³
Me	Me	H	H	2	H	H	H	Cl	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OH	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OEt	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr-i	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OBu-t	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPen-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OHex-c	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPh	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SH	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SEt	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Et	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPr-i	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPh	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NH ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHMe	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NMe ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHEt	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NEt ₂	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHPh	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	N(Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	2	H	H	H	CN	Cl

Me	Me	H	H	2	H	H	H	F	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	Cl	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OH	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OMe	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OEt	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr-i	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OBu-t	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPen-c	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OHex-c	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Ph	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPh	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SH	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SMe	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Me	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SEt	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Et	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPr-i	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPh	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Ph	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NH ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHMe	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NMe ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHEt	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NEt ₂	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHPh	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	N(Me)Ph	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	CN	Me
Me	Me	H	H	2	H	H	H	F	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	Cl	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OH	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OMe	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OEt	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr-i	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OBu-t	Pri

Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPen-c	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OHex-c	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Ph	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPh	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCHF ₂	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SH	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SMe	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Me	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SEt	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Et	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPr-i	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPh	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Ph	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SCHF ₂	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NH ₂	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHMe	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NMe ₂	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHEt	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NEt ₂	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHPh	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	N(Me)Ph	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	CN	Pri
Me	Me	H	H	2	H	H	H	F	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	Cl	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OH	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OMe	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OEt	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr-i	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OBu-t	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPen-c	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OHex-c	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Ph	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPh	Pr-c

Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCHF ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SH	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SMe	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Me	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SEt	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Et	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPr-i	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPh	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Ph	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SCHF ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NH ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHMe	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NMe ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHEt	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NEt ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHPh	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	N(Me)Ph	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	CN	Pr-c
Me	Me	H	H	2	H	H	H	F	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	Cl	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OH	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OMe	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OEt	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr-i	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OBu-t	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPen-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OHex-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPh	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCHF ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SH	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SMe	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Me	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SEt	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Et	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPr-i	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Pr-i	CHF ₂

Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPh	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SCHF ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NH ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHMe	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NMe ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHEt	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NEt ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHPh	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	N(Me)Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	CN	CHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	F	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHEt	CF ₃

Me	Me	H	H	2	H	H	H	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	H	F	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OH	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OMe	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OEt	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr-i	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OBu-t	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPen-c	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OHex-c	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Ph	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPh	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SH	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SMe	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Me	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SEt	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Et	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPr-i	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Pr-i	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPh	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Ph	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SCHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NH ₂	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHMe	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NMe ₂	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHEt	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NEt ₂	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHPh	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	N(Me)Ph	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	CN	OMe
Me	Me	H	H	2	H	H	H	F	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OH	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OMe	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OEt	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr-i	OPh

Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OBu-t	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPen-c	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OHex-c	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Ph	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPh	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCHF ₂	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SH	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SMe	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Me	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SEt	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Et	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPr-i	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Pr-i	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPh	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Ph	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SCHF ₂	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NH ₂	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHMe	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NMe ₂	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHEt	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NEt ₂	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHPh	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	N(Me)Ph	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	CN	OPh
Me	Me	H	H	2	H	H	H	F	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OEt	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr-i	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OBu-t	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPen-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OHex-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCH ₂ Ph	OCHF ₂

Me	Me	H	H	2	H	H	H	OPh	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	OCHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SEt	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPr-i	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Pr-i	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SPh	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SCHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NH ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NMe ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHEt	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NEt ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	NHPh	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	N(Me)Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	H	CN	OCHF ₂
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	F	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	SPr-i	CF ₃

Me	Me	H	H	2	H	H	Me	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	Me	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	F	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	NMe ₂	CF ₃

Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	F	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OPri	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	SPri	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	SO ₂ Pri	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	F	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OH	CF ₃

Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	F	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OCH ₂ Pen-c	CF ₃

Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	CN	CF ₃
H	H	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
H	H	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	H	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	H	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	H	Me	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	H	Me	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	Me	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	Me	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	Et	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	Et	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	Pri	H	H	H	CF ₃
Me	Me	H	H	2	Pri	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	Pri	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	2	Me	Me	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	2	Me	Me	H	OEt	CF ₃
Me	Et	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Et	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
Et	Et	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
Et	Et	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃

Me	Pr-i	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Pr-i	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Pr	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Pr	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Pr-c	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Pr-c	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
-(CH ₂) ₂ -		H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₂ -		H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
-(CH ₂) ₃ -		H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₃ -		H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
-(CH ₂) ₄ -		H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₄ -		H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
-(CH ₂) ₅ -		H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₅ -		H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₃ -	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₃ -	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₄ -	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₄ -	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₅ -	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₅ -	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₆ -	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₆ -	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OH	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OEt	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr-i	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OBu-t	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPen-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OHex-c	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPh	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SH	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SEt	Cl

Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Et	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPr-i	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPh	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NH ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHMe	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NMe ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHEt	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NEt ₂	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHPh	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	N(Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	CN	Cl
Me	Me	H	H	1	H	H	H	F	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OH	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OEt	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr-i	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OBu-t	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPen-c	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OHex-c	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Ph	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPh	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SH	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SMe	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Me	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SEt	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Et	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPr-i	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPh	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Ph	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NH ₂	Me

Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHMe	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NMe ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHEt	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NEt ₂	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHPh	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	N(Me)Ph	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	CN	Me
Me	Me	H	H	1	H	H	H	F	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OH	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OEt	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr-i	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OBu-t	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPen-c	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OHex-c	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Ph	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPh	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCHF ₂	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SH	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SMe	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Me	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SEt	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Et	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPr-i	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPh	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Ph	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SCHF ₂	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NH ₂	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHMe	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NMe ₂	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHEt	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NEt ₂	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHPh	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	N(Me)Ph	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	CN	Pri
Me	Me	H	H	1	H	H	H	F	Pr-c

Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OH	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OEt	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr-i	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OBu-t	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPen-c	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OHex-c	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Ph	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPh	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCHF ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SH	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SMe	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Me	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SEt	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Et	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPr-i	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPh	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Ph	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SCHF ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NH ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHMe	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NMe ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHEt	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NEt ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHPh	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	N(Me)Ph	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	CN	Pr-c
Me	Me	H	H	1	H	H	H	F	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OH	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OEt	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr-i	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OBu-t	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	CHF ₂

Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPen-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OHex-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPh	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCHF ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SH	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SMe	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Me	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SEt	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Et	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPr-i	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Pr-i	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPh	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SCHF ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NH ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHMe	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NMe ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHEt	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NEt ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHPh	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	N(Me)Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	CN	CHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	F	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCHF ₂	CF ₃

Me	Me	H	H	1	H	H	H	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	H	F	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OH	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OEt	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr-i	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OBu-t	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPen-c	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OHex-c	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Ph	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPh	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SH	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SMe	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Me	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SEt	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Et	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPr-i	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Pr-i	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPh	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Ph	OMe

Me	Me	H	H	1	H	H	H	SCHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NH ₂	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHMe	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NMe ₂	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHEt	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NEt ₂	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHPh	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	N(Me)Ph	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	CN	OMe
Me	Me	H	H	1	H	H	H	F	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OH	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OEt	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr-i	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OBu-t	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPen-c	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OHex-c	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Ph	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPh	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCHF ₂	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SH	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SMe	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Me	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SEt	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Et	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPr-i	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Pr-i	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPh	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Ph	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SCHF ₂	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NH ₂	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHMe	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NMe ₂	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHEt	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NEt ₂	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHPh	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	N(Me)Ph	OPh

Me	Me	H	H	1	H	H	H	CN	OPh
Me	Me	H	H	1	H	H	H	F	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OEt	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr-i	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OBu-t	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPen-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OHex-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCH ₂ Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OPh	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	OCHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SEt	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPr-i	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Pr-i	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SPh	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SCHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NH ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NMe ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHEt	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NEt ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	NHPh	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	N(Me)Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	H	CN	OCHF ₂
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	F	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OBu-t	CF ₃

Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	Me	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	F	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OPh	CF ₃

Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	OMe	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	F	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	SO ₂ Pr-i	CF ₃

Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SMe	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	F	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	NHEt	CF ₃

Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	SO ₂ Me	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	F	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	1	H	H	NH ₂	CN	CF ₃
H	H	H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
H	H	H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	H	H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	H	H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃

Me	H	Me	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	H	Me	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	Me	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	Me	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	Et	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	Et	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	Pri	H	H	H	CF ₃
Me	Me	H	H	1	Pri	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	Pri	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	1	Me	Me	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	1	Me	Me	H	OEt	CF ₃
Me	Et	H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Et	H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
Et	Et	H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
Et	Et	H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Pri	H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Pri	H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Pr	H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Pr	H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Pr-c	H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Pr-c	H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
-(CH ₂) ₂ -		H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₂ -		H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
-(CH ₂) ₃ -		H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₃ -		H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
-(CH ₂) ₄ -		H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₄ -		H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
-(CH ₂) ₅ -		H	H	1	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₅ -		H	H	1	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₃ -	H	1	H	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₃ -	H	1	H	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₄ -	H	1	H	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₄ -	H	1	H	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₅ -	H	1	H	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₅ -	H	1	H	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₆ -	H	1	H	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₆ -	H	1	H	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Cl	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OH	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	Cl

Me	Me	H	H	0	H	H	H	OEt	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr-i	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OBu-t	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPen-c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OHex-c	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPh	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SH	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Me	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SEt	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Et	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPr-i	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPh	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SCHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NH ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHMe	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NMe ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHEt	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NEt ₂	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHPh	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	N(Me)Ph	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	CN	Cl
Me	Me	H	H	0	H	H	H	F	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Cl	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OH	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OEt	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr-i	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OBu-t	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Me

Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPen-c	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OHex-c	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Ph	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPh	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SH	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SMe	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Me	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SEt	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Et	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPr-i	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPh	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Ph	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SCHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NH ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHMe	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NMe ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHEt	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NEt ₂	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHPh	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	N(Me)Ph	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	CN	Me
Me	Me	H	H	0	H	H	H	F	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Cl	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OH	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OEt	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr-i	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OBu-t	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPen-c	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OHex-c	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Ph	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPh	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCHF ₂	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SH	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SMe	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Me	Pri

Me	Me	H	H	0	H	H	H	SEt	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Et	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPr-i	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPh	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Ph	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SCHF ₂	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NH ₂	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHMe	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NMe ₂	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHEt	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NEt ₂	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHPh	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	N(Me)Ph	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	CN	Pri
Me	Me	H	H	0	H	H	H	F	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Cl	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OH	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OEt	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr-i	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OBu-t	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPen-c	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OHex-c	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Ph	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPh	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCHF ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SH	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SMe	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Me	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SEt	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Et	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPr-i	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Pr-i	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPh	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Ph	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SCHF ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	Pr-c

Me	Me	H	H	0	H	H	H	NH ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHMe	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NMe ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHEt	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NEt ₂	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHPh	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	N(Me)Ph	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	CN	Pr-c
Me	Me	H	H	0	H	H	H	F	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Cl	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OH	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OEt	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr-i	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OBu-t	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPen-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OHex-c	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPh	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCHF ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SH	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SMe	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Me	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SEt	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Et	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPr-i	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Pr-i	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPh	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SCHF ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NH ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHMe	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NMe ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHEt	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NEt ₂	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHPh	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	N(Me)Ph	CHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	CN	CHF ₂

Me	Me	H	H	0	H	H	H	F	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OE _t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OP _r -i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OP _r	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OBu _t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pr _c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Bu _c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pen _c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Hex _c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPen _c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OHex _c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SE _t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ E _t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SP _r -i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Pr _i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHE _t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NE _t ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	H	F	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OH	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OE _t	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OP _r -i	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OP _r	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OBu _t	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pr _c	OMe

Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPen-c	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OHex-c	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Ph	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPh	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SH	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SMe	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Me	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SEt	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Et	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPr-i	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Pr-i	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPh	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Ph	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SCHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NH ₂	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHMe	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NMe ₂	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHEt	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NEt ₂	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHPh	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	N(Me)Ph	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	CN	OMe
Me	Me	H	H	0	H	H	H	F	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OH	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OEt	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr-i	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OBu-t	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPen-c	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OHex-c	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Ph	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPh	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCHF ₂	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SH	OPh

Me	Me	H	H	0	H	H	H	SMe	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Me	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SEt	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Et	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPr-i	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Pr-i	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPh	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Ph	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SCHF ₂	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NH ₂	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHMe	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NMe ₂	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHEt	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NEt ₂	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHPh	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	N(Me)Ph	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	CN	OPh
Me	Me	H	H	0	H	H	H	F	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OEt	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr-i	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPr	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OBu-t	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pr-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Bu-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Pen-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Hex-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPen-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OHex-c	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCH ₂ Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OPh	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	OCHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SH	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Me	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SEt	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Et	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPr-i	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Pr-i	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SPh	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	SCHF ₂	OCHF ₂

Me	Me	H	H	0	H	H	H	SO ₂ CHF ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NH ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHMe	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NMe ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHEt	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NEt ₂	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	NHPh	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	N(Me)Ph	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	H	CN	OCHF ₂
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	F	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	Me	N(Me)Ph	CF ₃

Me	Me	H	H	0	H	H	Me	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	F	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	F	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OPr	CF ₃

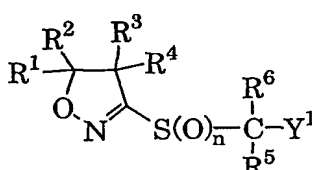
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SMe	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	F	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OCH ₂ Ph	CF ₃

Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	SPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	SO ₂ Me	CN	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	F	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	Cl	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OPr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OPr	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OBu-t	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OCH ₂ Pr-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OCH ₂ Bu-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OCH ₂ Pen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OCH ₂ Hex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OPen-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OHex-c	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OCH ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	OCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	SH	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	SMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	SO ₂ Me	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	SEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	SO ₂ Et	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	SPr-i	CF ₃

Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	SO ₂ Pr-i	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	SPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	SO ₂ Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	SCHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	SO ₂ CHF ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	NH ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	NHMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	NMe ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	NHEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	NEt ₂	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	NHPh	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	N(Me)Ph	CF ₃
Me	Me	H	H	0	H	H	NH ₂	CN	CF ₃
H	H	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
H	H	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	H	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	H	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	H	Me	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	H	Me	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	Me	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	Me	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	Et	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	Et	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	Pr-i	H	H	H	CF ₃
Me	Me	H	H	0	Pr-i	H	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	Pr-i	H	H	OEt	CF ₃
Me	Me	H	H	0	Me	Me	H	OMe	CF ₃
Me	Me	H	H	0	Me	Me	H	OEt	CF ₃
Me	Et	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Et	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
Et	Et	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
Et	Et	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Pr-i	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Pr-i	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Pr	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Pr	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	Pr-c	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	Pr-c	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
-(CH ₂) ₂ -		H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₂ -		H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃

-(CH ₂) ₃ -	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₃ -	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
-(CH ₂) ₄ -	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₄ -	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
-(CH ₂) ₅ -	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
-(CH ₂) ₅ -	H	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₃ -	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₃ -	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₄ -	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₄ -	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₅ -	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₅ -	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃
H	-(CH ₂) ₆ -	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃
H	-(CH ₂) ₆ -	H	0	H	H	H	OEt	CF ₃

表 9

							
R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Y ¹
Me	Me	H	H	2	H	H	Pyridin-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	Pyridin-2-yl 1-oxide
Me	Me	H	H	2	H	H	Pyridin-4-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	Pyridin-4-yl 1-oxide
Me	Me	H	H	2	H	H	1,2,4-Oxadiazol-3-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	3-Phenyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	3-Benzyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	2-Chlorothiazol-4-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	5-Trifluoromethyl-1,3,4-thiadiazol-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	1,4-Dimethylimidazol-5-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	1-Phenyl-4-methoxycarbonyl-1,2,3-triazol-5-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	1-Difluoromethyl-1,2,4-triazol-3-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	1-Difluoromethyl-1,2,4-triazol-5-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	4-Difluoromethyl-1,2,4-triazol-3-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	4,6-Diethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	4,6-Dimethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	4-Chloro-6-methylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	4-Methoxy-6-methylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	4-Difluoromethoxy-6-methylpyrimidin-2-yl

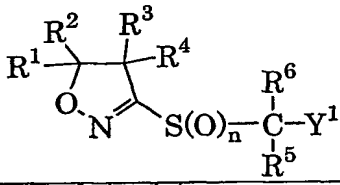
Me	Me	H	H	2	H	H	4-Phenoxy-6-methylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	4-Chloro-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	4-Methoxy-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	4-Difluoromethoxy-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	4-Phenoxy-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
H	H	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	H	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	H	Me	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	Me	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	Et	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	Pr-i	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	2	Me	Me	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Et	Et	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Pr-i	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Pr	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Pr-c	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
	-(CH ₂) ₂ -	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
	-(CH ₂) ₃ -	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
	-(CH ₂) ₄ -	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
	-(CH ₂) ₅ -	H	H	2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₃ -	H		2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₄ -	H		2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₅ -	H		2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₆ -	H		2	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	Pyridin-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	Pyridin-2-yl 1-oxide
Me	Me	H	H	1	H	H	Pyridin-4-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	Pyridin-4-yl 1-oxide
Me	Me	H	H	1	H	H	1,2,4-Oxadiazol-3-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	3-Phenyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	3-Benzyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	2-Chlorothiazol-4-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	5-Trifluoromethyl-1,3,4-thiadiazol-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	1,4-Dimethylimidazol-5-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	1-Phenyl-4-methoxycarbonyl-1,2,3-triazol-5-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	1-Difluoromethyl-1,2,4-triazol-3-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	1-Difluoromethyl-1,2,4-triazol-5-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	4-Difluoromethyl-1,2,4-triazol-3-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	4,6-Diethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	4,6-Dimethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	4-Chloro-6-methylpyrimidin-2-yl

Me	Me	H	H	1	H	H	4-Methoxy-6-methylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	4-Difluoromethoxy-6-methylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	4-Phenoxy-6-methylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	4-Chloro-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	4-Methoxy-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	4-Difluoromethoxy-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	4-Phenoxy-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
H	H	H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	H	H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	H	Me	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	Me	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	Et	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	Pr-i	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	1	Me	Me	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Et	H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Et	Et	H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Pr-i	H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Pr	H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Pr-c	H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
-(CH ₂) ₂ -		H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
-(CH ₂) ₃ -		H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
-(CH ₂) ₄ -		H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
-(CH ₂) ₅ -		H	H	1	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₃ -	H	1	H	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₄ -	H	1	H	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	1	H	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	1	H	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	Pyridin-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	Pyridin-2-yl 1-oxide
Me	Me	H	H	0	H	H	Pyridin-4-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	Pyridin-4-yl 1-oxide
Me	Me	H	H	0	H	H	1,2,4-Oxadiazol-3-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	3-Phenyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	3-Benzyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	2-Chlorothiazol-4-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	5-Trifluoromethyl-1,3,4-thiadiazol-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	1,4-Dimethylimidazol-5-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	1-Phenyl-4-methoxycarbonyl-1,2,3-triazol-5-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	1-Difluoromethyl-1,2,4-triazol-3-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	1-Difluoromethyl-1,2,4-triazol-5-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	4-Difluoromethyl-1,2,4-triazol-3-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	4,6-Diethoxypyrimidin-2-yl

Me	Me	H	H	0	H	H	4,6-Dimethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	4-Chloro-6-methylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	4-Methoxy-6-methylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	4-Difluoromethoxy-6-methylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	4-Phenoxy-6-methylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	4-Chloro-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	4-Methoxy-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	4-Difluoromethoxy-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	4-Phenoxy-6-trifluoromethylpyrimidin-2-yl
H	H	H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	H	H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	H	Me	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	Me	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	Et	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	Pr-i	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Me	H	H	0	Me	Me	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Et	H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Et	Et	H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Pr-i	H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Pr	H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Pr-c	H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	CH ₂ Pr-c	H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
-(CH ₂) ₂ -		H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
-(CH ₂) ₃ -		H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
-(CH ₂) ₄ -		H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
-(CH ₂) ₅ -		H	H	0	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₃ -	H	0	H	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₄ -	H	0	H	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₅ -	H	0	H	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
H	-(CH ₂) ₆ -	H	0	H	H	H	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Pirrol-1-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Oxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Thiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Thiazol-4-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	1,2,3-Thiadiazol-4-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	1,2,3-Thiadiazol-5-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	1,2,4-Thiadiazol-3-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	1,2,4-Thiadiazol-5-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	1,3,4-Thiadiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	1,3,4-Thiadiazol-5-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Pyridin-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Pyridin-3-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Pyridin-4-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	1H-Imidazol-2-yl

Me	Et	H	H	2	H	H	1H-Imidazol-4-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	1H-Imidazol-5-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	1H-1,3,4-Triazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	1H-1,3,4-Triazol-5-yl

表 1 0

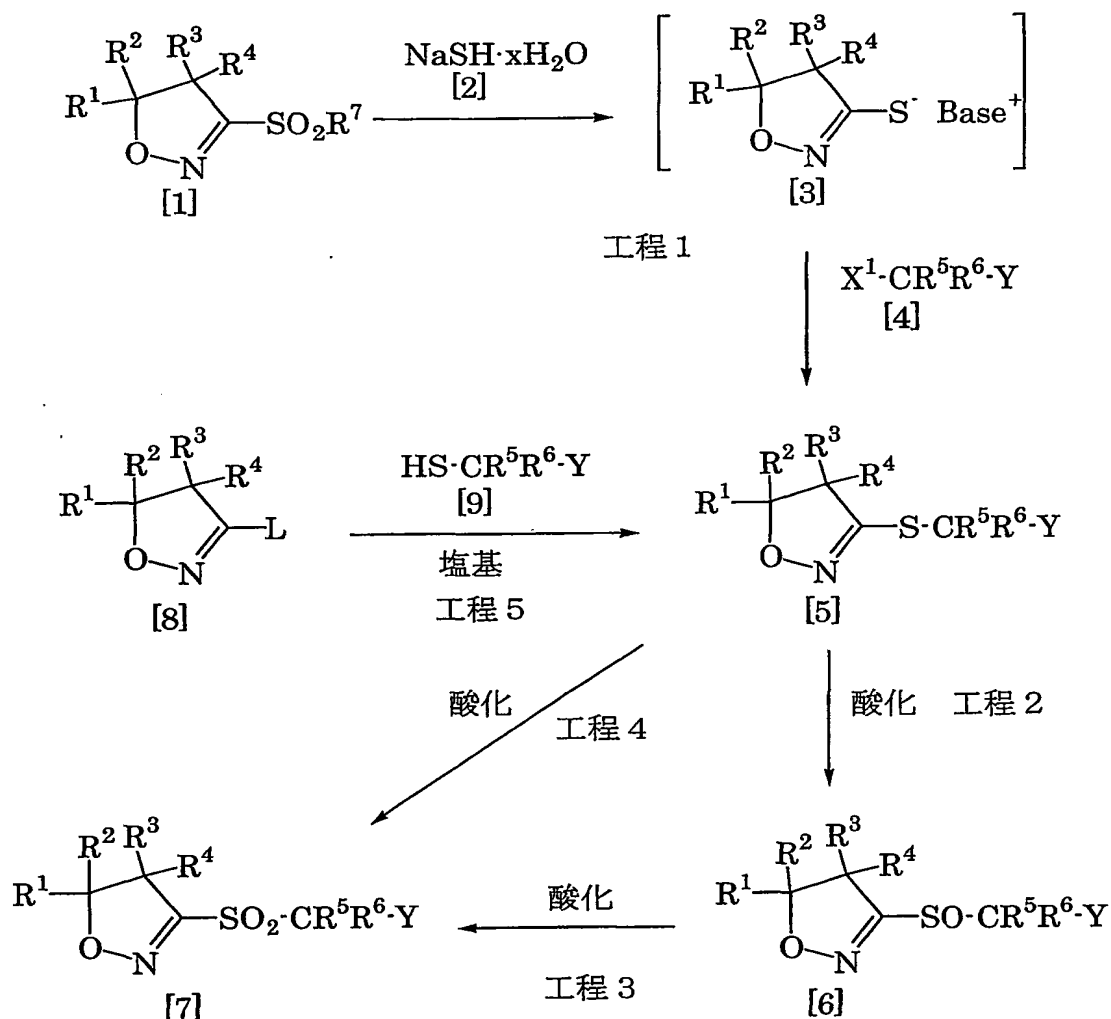
							
R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Y ¹
Me	Me	H	H	2	H	H	Benzimidazol-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	Benzothiophen-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	3-Chlorobenzothiophen-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	Benzotriazol-1-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	1-Methylindazol-4-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	Benzothiazol-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	Benzothiophen-3-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	5-Chlorobenzothiophen-3-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	Benzoxazol-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	3-Methylbenzothiophen-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	3-Bromobenzothiophen-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	Benzofuran-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	2-Methylbenzofuran-7-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	3-Bromobenzofuran-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	Benzothiophen-7-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	1-Methylindazol-7-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	1-Difluoromethylindazol-7-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	3-Methylbenzofuran-2-yl
Me	Me	H	H	2	H	H	3-Chloro-1-methylindol-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	Benzimidazol-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	Benzothiophen-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	3-Chlorobenzothiophen-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	Benzotriazol-1-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	1-Methylindazol-4-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	Benzothiazol-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	Benzothiophen-3-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	5-Chlorobenzothiophen-3-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	Benzoxazol-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	3-Methylbenzothiophen-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	3-Bromobenzothiophen-2-yl

Me	Me	H	H	1	H	H	Benzofuran-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	2-Methylbenzofuran-7-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	3-Bromobenzofuran-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	Benzothiophen-7-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	1-Methylindazol-7-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	3-Methylbenzofuran-2-yl
Me	Me	H	H	1	H	H	3-Chloro-1-methylindol-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	Benzimidazol-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	Benzothiophen-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	3-Chlorobenzothiophen-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	Benzotriazol-1-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	1-Methylindazol-4-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	Benzothiazol-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	Benzothiophen-3-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	5-Chlorobenzothiophen-3-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	Benzoxazol-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	3-Methylbenzothiophen-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	3-Bromobenzothiophen-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	Benzofuran-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	2-Methylbenzofuran-7-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	3-Bromobenzofuran-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	Benzothiophen-7-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	1-Methylindazol-7-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	3-Methylbenzofuran-2-yl
Me	Me	H	H	0	H	H	3-Chloro-1-methylindol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Benzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4-Chlorobenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	5-Chlorobenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	6-Chlorobenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	7-Chlorobenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4-Fluorobenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	5-Fluorobenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	6-Fluorobenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	7-Fluorobenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4-Methylbenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	5-Methylbenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	6-Methylbenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	7-Methylbenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4-Methoxybenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	5-Methoxybenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	6-Methoxybenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	7-Methoxybenzoxazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Benzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4-Chlorobenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	5-Chlorobenzothiazol-2-yl

Me	Et	H	H	2	H	H	6-Chlorobenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	7-Chlorobenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4-Fluorobenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	5-Fluorobenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	6-Fluorobenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	7-Fluorobenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4-Methylbenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	5-Methylbenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	6-Methylbenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	7-Methylbenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4-Methoxybenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	5-Methoxybenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	6-Methoxybenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	7-Methoxybenzothiazol-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Quolin-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Qinolin-6-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Quinoxalin-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	Benzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	3-Chlorobenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4-Chlorobenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	5-Chlorobenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	6-Chlorobenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	7-Chlorobenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	3-Methylbenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4-Methylbenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	5-Methylbenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	6-Methylbenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	7-Methylbenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	3-Methoxybenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	4-Methoxybenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	5-Methoxybenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	6-Methoxybenzofuran-2-yl
Me	Et	H	H	2	H	H	7-Methoxybenzofuran-2-yl

一般式 [I] を有する本発明化合物は、以下に示す製造法に従って製造することができるが、これらの方法に限定されるものではない。

<製造法 1> 工程 1～工程 5



(式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 及び Y は前記と同じ意味を表し、 X^1 はハロゲン原子を表し、 R^7 は $\text{C}1 \sim \text{C}4$ アルキル基、置換されていてもよいフェニル基又は置換されていてもよいベンジル基を表し、 L はハロゲン原子、 $\text{C}1 \sim \text{C}4$ アルキルスルホニル基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基又は置換されていてもよいベンジルスルホニル基等の脱離基を表し、 X は1以上の整数を表す。)

以下、上記製造方法を各工程毎に詳説する。

(工程 1)

10 一般式[5]で表されるスルフィド誘導体は、一般式[1]で表される化合物と、

一般式〔2〕で示される水硫化ナトリウム水和物とを、溶媒中又は溶媒の非存在下で（好ましくは適当な溶媒中）、塩基の存在下反応させることにより一般式〔3〕で表されるメルカプタンの塩を反応系内で製造した後、メルカプタンの塩〔3〕を単離することなく一般式〔4〕で表されるハロゲン誘導体とを反応させること（場
5 合によってはラジカル発生剤〔例えばロンガリット（商品名）： $\text{CH}_2(\text{OH})\text{SO}_2\text{Na} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ 等〕を添加することができる）によって製造することができる。

反応温度は、いずれの反応も 0°C から反応系における還流温度までの任意の温度、好ましくは $10^\circ\text{C} \sim 100^\circ\text{C}$ の温度範囲であり、反応時間は、化合物により異なるが 0.5 時間 ~ 24 時間である。

- 10 反応に供される試剤の量は、一般式〔1〕で表される化合物 1 当量に対して、一般式〔2〕で表される化合物又は一般式〔4〕で表される化合物は $1 \sim 3$ 当量、塩基を使用する場合は、塩基 $0.5 \sim 3$ 当量である。

- 溶媒としては、例えばジオキサン、テトラヒドロフラン（THF）等のエーテル類、ジクロロエタン、四塩化炭素、クロロベンゼン又はジクロロベンゼン等のハロ
15 ゲン化炭化水素類、N,N-ジメチルアセトアミド、N,N-ジメチルホルムアミド又はN-メチル-2-ピロリジノン等のアミド類、ジメチルスルホキシド又はスルホラン等の硫黄化合物、ベンゼン、トルエン又はキシレン等の芳香族炭化水素類、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、ブタノール又はtert-
20 ニトリル等のニトリル類、水或いはこれらの混合物が挙げられる。

- 塩基としては、例えば水素化ナトリウム等の金属水素化物、ナトリウムアミド又はリチウムジイソプロピルアミド等のアルカリ金属アミド類、ピリジン、トリエチルアミン又は1,8-ジアザビシクロ〔5.4.0〕-7-ウンデセン等の有機塩基
25 類、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム等のアルカリ金属水酸化物、水酸化カルシウム又は水酸化マグネシウム等のアルカリ土類金属水酸化物、炭酸ナトリウム又は

炭酸カリウム等のアルカリ金属炭酸塩、炭酸水素ナトリウム又は炭酸水素カリウム等のアルカリ金属重炭酸塩或いはナトリウムメトキシド又はカリウムtert-ブトキシド等の金属アルコラートが挙げられる。

(工程2)

- 5 一般式〔6〕で表されるスルホキシド誘導体は、一般式〔5〕で表されるスルフィド誘導体と酸化剤とを、適当な溶媒中で反応させることにより製造することができる。

反応温度は、0℃から反応系における還流温度までの任意の温度、好ましくは0℃～60℃の温度範囲であり、反応時間は、化合物により異なるが1時間～72

10 時間である。

反応に供される試剤の量は、一般式〔5〕で表される化合物1当量に対して酸化剤1～3当量である。

- 溶媒としては、例えばジクロロメタン、クロロホルム、ジクロロエタン、四塩化炭素、クロロベンゼン又はジクロロベンゼン等のハロゲン化炭化水素類、ジオキサン、テトラヒドロフラン (THF)、ジメトキシエタン又はジエチルエーテル等の
- 15 エーテル類、N,N-ジメチルアセトアミド、N,N-ジメチルホルムアミド又はN-メチルー2-ピロリジノン等のアミド類、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、ブタノール又はtert-ブタノール等のアルコール類、アセトン又は2-ブタノン等のケトン類、アセトニトリル等のニトリル類、酢酸、水或
- 20 いはこれらの混合物が挙げられる。

酸化剤としては、例えば、m-クロロ過安息香酸、過ギ酸又は過酢酸等の有機過酸化物、過酸化水素、過マンガン酸カリウム又は過ヨウ素酸ナトリウム等の無機過酸化物が挙げられる。

(工程3)

- 25 一般式〔7〕で表されるスルホン誘導体は、一般式〔6〕で表されるスルホキシ

ド誘導体と酸化剤とを、適当な溶媒中で反応させることにより製造することができる。

反応温度は、0℃から反応系における還流温度までの任意の温度、好ましくは0℃～60℃の温度範囲であり、反応時間は、化合物により異なるが1時間～72

5 時間である。

反応に供される試剤の量は一般式〔6〕で表される化合物1当量に対して酸化剤は1～3当量である。

溶媒及び酸化剤としては、工程2と同様なものが挙げられる。

(工程4)

10 一般式〔7〕で表されるスルホン誘導体は、適当な溶媒中、一般式〔5〕で表されるスルフィド誘導体と好適な量の酸化剤により、一般式〔6〕で表されるスルホキシド誘導体を単離することなく製造することもできる。

反応温度は、0℃から反応系における還流温度までの任意の温度、好ましくは0℃～60℃の温度範囲であり、反応時間は、化合物により異なるが1時間～72

15 時間である。

反応に供される試剤の量は、一般式〔5〕で表される化合物1当量に対して酸化剤1～3当量である。

溶媒及び酸化剤としては、工程2と同様なものが挙げられる。

(工程5)

20 一般式〔5〕で示されるスルフィド誘導体は、一般式〔8〕で表される化合物と、一般式〔9〕で示されるメルカプタン誘導体とを、溶媒中又は溶媒の非存在下で(好ましくは適当な溶媒中)、塩基の存在下で反応させることにより製造することもできる。

反応温度は、0℃から反応系における還流温度までの任意の温度、好ましくは1

25 0℃～100℃の温度範囲であり、反応時間は、化合物により異なるが0.5時間

～24時間である。

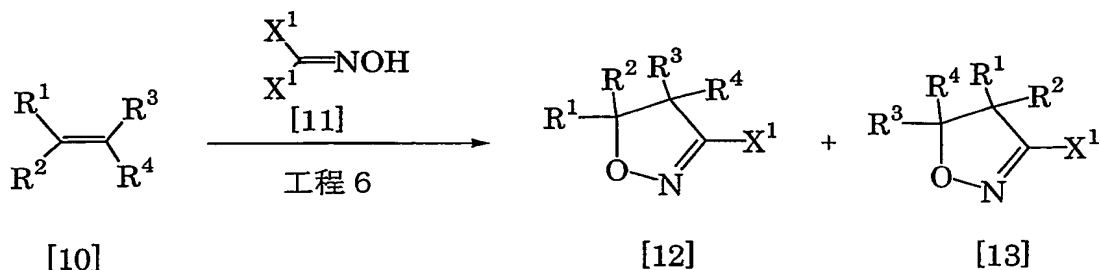
反応に供される試剤の量は、一般式〔8〕で表される化合物1当量に対して、一般式〔9〕で表される化合物1～3当量、塩基0.5～3当量である。

溶媒としては、例えばジエチルエーテル、ジメトキシエタン、ジオキサン又はテ
5 トラヒドロフラン（THF）等のエーテル類、ジクロロメタン、クロロホルム、四
塩化炭素、ジクロロエタン、クロロベンゼン又はジクロロベンゼン等のハロゲン化
炭化水素類、N,N-ジメチルアセトアミド、N,N-ジメチルホルムアミド又はN
-メチルー2-ピロリジノン等のアミド類、ジメチルスルホキシド又はスルホラン
等の硫黄化合物、ベンゼン、トルエン又はキシレン等の芳香族炭化水素類、メタノ
10 ール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、ブタノール又はtert-ブタ
ノール等のアルコール類、アセトン又は2-ブタノン等のケトン類、アセトニトリ
ル等のニトリル類、水或いはこれらの混合物が挙げられる。

塩基としては、例えば水素化ナトリウム等の金属水素化物、ナトリウムアミド又
はリチウムジイソプロピルアミド等のアルカリ金属アミド、ピリジン、トリエチル
15 アミン又は1,8-ジアザビシクロ〔5.4.0〕-7-ウンデセン等の有機塩基、
水酸化ナトリウム又は水酸化カリウム等のアルカリ金属水酸化物、水酸化カルシウ
ム又は水酸化マグネシウム等のアルカリ土類金属水酸化物、炭酸ナトリウム又は炭
酸カリウム等のアルカリ金属炭酸塩、炭酸水素ナトリウム又は炭酸水素カリウム等
のアルカリ金属重炭酸塩或いはナトリウムメトキシド又はカリウムtert-ブトキ
20 シド等の金属アルコラートが挙げられる。

一般式〔8〕で示される化合物のうちLがハロゲン原子で表される化合物〔12〕
は、工程6で示される方法により製造することができ、必要に応じ〔12〕と〔1
3〕を分離精製して化合物〔12〕を得る。

（工程6）



(式中、X¹、R¹、R²、R³及びR⁴は前記と同じ意味を表す。)

一般式 [1 2] 及び [1 3] で表されるイソオキサゾリン化合物は、一般式 [1 0] で表されるオレフィン誘導体と、一般式 [1 1] で示されるオキシム誘導体とを、溶媒中又は溶媒の非存在下で（好ましくは適当な溶媒中）、塩基の存在下で反応させることにより製造することができる。但し、R³、R⁴の両者が水素原子の場合には一般式 [1 2] で表されるイソオキサゾリン化合物が優先的に得られる。

反応温度は、0℃から反応系における還流温度までの任意の温度、好ましくは 10℃～80℃の温度範囲であり、反応時間は、化合物により異なるが0.5時間～2週間である。

反応に供される試剤の量は一般式 [1 1] で表される化合物 1 当量に対して、一般式 [1 0] で表される化合物は 1～3 当量である。

溶媒としては、例えばエチレングリコールジメチルエーテル、エチレングリコールジエチルエーテル、ジエチルエーテル、ジオキサン又はテトラヒドロフラン等のエーテル類、ジクロロエタン、四塩化炭素、クロロベンゼン又はジクロロベンゼン等のハロゲン化炭化水素類、ベンゼン、トルエン又はキシレン等の芳香族炭化水素類、酢酸エチル又は酢酸ブチル等の酢酸エステル類、水或いはこれらの混合物等が挙げられる。

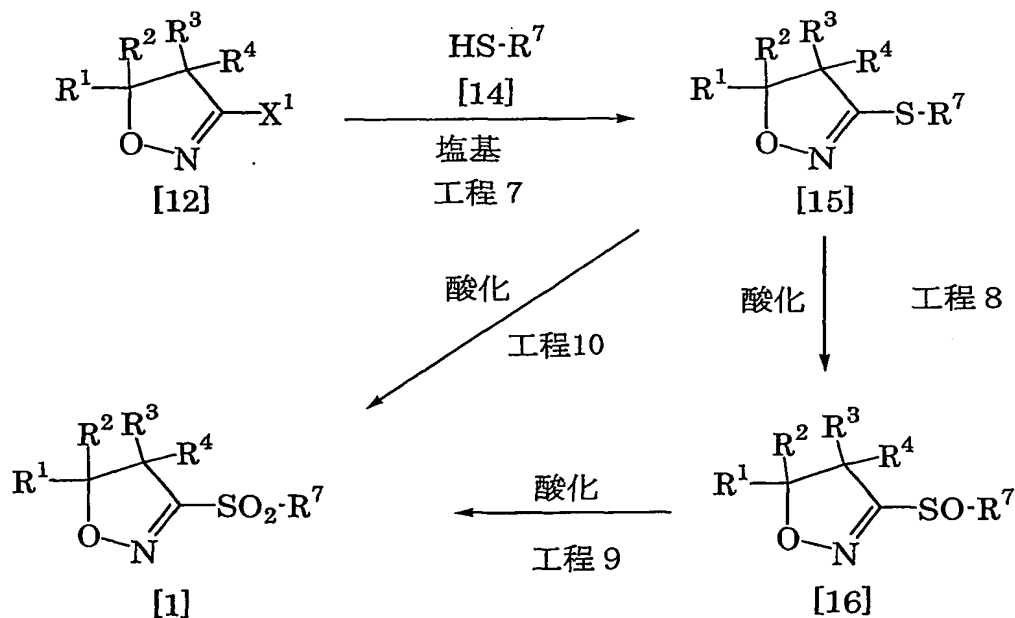
塩基としては、例えば水酸化ナトリウム又は水酸化カリウム等のアルカリ金属水酸化物、水酸化カルシウム又は水酸化マグネシウム等のアルカリ土類金属水酸化物、

炭酸ナトリウム又は炭酸カリウム等のアルカリ金属炭酸塩、炭酸水素ナトリウム又は炭酸水素カリウム等のアルカリ金属重炭酸塩、酢酸ナトリウム又は酢酸カリウム等のアルカリ金属酢酸塩、フッ化ナトリウム又はフッ化カリウム等のアルカリ金属のフッ素化塩或いはピリジン、トリエチルアミン又は1,8-ジアザビシクロ[5.4.0]

5 4.0] - 7-ウンデセン等の有機塩基等が挙げられる。

尚、上記製造方法で用いる製造中間体である一般式[10]で表される化合物は、市販のものを用いるか、又は、ウィッティヒ(Wittig)反応等の公知の反応により製造することができる。又、一般式[11]で示される化合物は、例えば、Liebig's Annalen der Chemie, 985 (1989)に記載の方法に準じて製造することができる。

10 一般式[1]で表される化合物は、前記に示した一般式[12]で表される化合物から以下の方法により製造することができる。



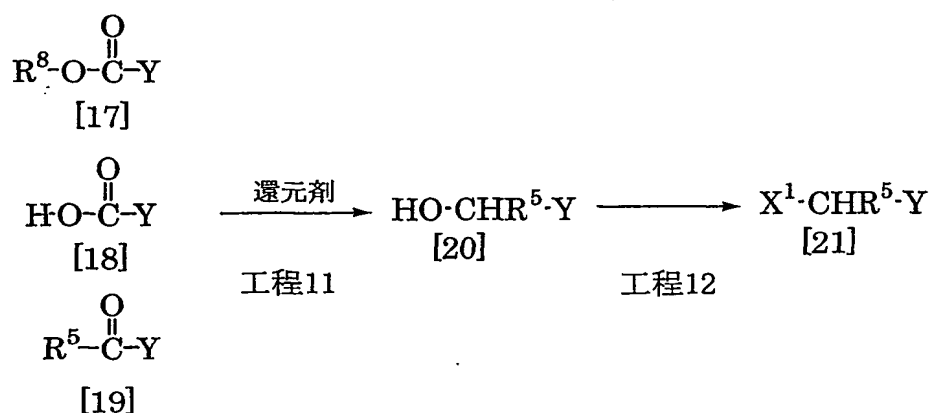
(式中、 X^1 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 及び R^7 は前記と同じ意味を表す。)

15 一般式[15]で表される化合物は前記記載の工程5、一般式[16]で表される化合物は前記記載の工程2、一般式[1]で表される化合物は化合物[15]か

ら前記記載の工程 4 又は化合物 [16] から工程 3 で示した方法に準じ製造することができる。

溶媒、塩基及び酸化剤としては、工程 2、工程 3、工程 4 又は工程 5 で記載したものと同一ものが挙げられる。

- 5 一般式 [4] で表される化合物中の R^6 が水素原子のものである、一般式 [21] で表される化合物は、以下の方法により製造することができる。



(式中、 R^5 、 X^1 及びYは前記と同じ意味を表し、 R^8 はアルキル基を表す。)

(工程 11)

- 10 一般式 [20] で表される化合物は、化合物 [17]、[18] 又は [19] と還元剤とを溶媒中で反応することにより製造することができる。

この反応は通常、反応温度 $-60 \sim 150^\circ\text{C}$ で 10 分～24 時間反応させる。

反応に供される試剤の量は、化合物 [17]、[18] 又は [19] 1 当量に対して、還元剤 0.5～2 当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させる

- 15 ことができる。

還元剤としては、[17] から [20] の製造では、例えば水素化ジイソブチルアルミニウム等の金属水素化物、或いは水素化ホウ素ナトリウム又は水素化リチウムアルミニウム等の金属水素錯化合物が、[18] 又は [19] から [20] の製造では、例えば水素化ジイソブチルアルミニウム等の金属水素化物、水素化ホウ素

ナトリウム又は水素化リチウムアルミニウム等の金属水素錯化合物、或いはジボランが挙げられる。

溶媒としては、例えばジエチルエーテル、テトラヒドロフラン又はジオキサン等のエーテル類、ベンゼン又はトルエン等の芳香族炭化水素類、メタノール又はエタ

5 ノール等のアルコール類が挙げられる。

(工程 12)

一般式〔21〕で表される化合物は、化合物〔20〕とハロゲン化剤とを溶媒中で反応させることにより、製造することができる。

この反応は通常、反応温度 $-50\sim 100^{\circ}\text{C}$ で10分 \sim 24時間行う。

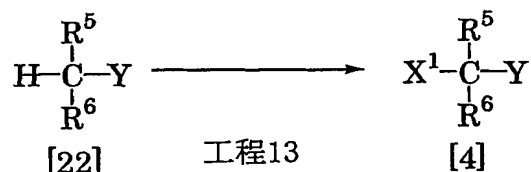
10 反応に供される試剤の量は、化合物〔20〕1当量に対して、ハロゲン化剤1 \sim 3当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。

ハロゲン化剤としては、例えば塩化水素、臭化水素、三塩化リン、三臭化リン又は塩化チオニル等が挙げられる。

溶媒としては、例えばジクロロエタン又は四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類、

15 酢酸等の酸類或いはテトラヒドロフラン等のエーテル類が挙げられる。

一般式〔4〕で表される化合物は、以下の方法により製造することができる。



(式中、 R^5 、 R^6 、 X^1 及び Y は前記と同じ意味を表す。)

20 一般式〔4〕で表される化合物は、化合物〔22〕とハロゲン化剤とを溶媒中、触媒の存在下又は非存在下で反応させることにより製造することができる。

この反応は通常、反応温度 $30\sim 150^{\circ}\text{C}$ で10分 \sim 24時間反応させる。

反応に供される試剤の量は、化合物〔22〕1当量に対して、ハロゲン化剤1 \sim

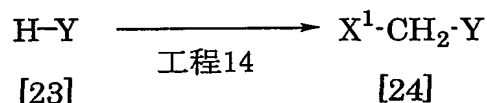
10 当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。触媒の量は0.01～0.5当量である。

ハロゲン化剤としては、例えば臭素又は塩素等のハロゲン、N-ブromoコハク酸イミド等のN-ハロコハク酸イミド、或いは過臭化ピリジニウム等のピリジン塩等
5 が挙げられる。

溶媒としては、例えばジクロロエタン、四塩化炭素、クロロベンゼン又はジクロロベンゼン等のハロゲン化炭化水素類、N,N-ジメチルアセトアミド、N,N-ジメチルホルムアミド又はN-メチル-2-ピロリジノン等のアミド類、ジメチルスルホキシド又はスルホラン等の硫黄化合物、ギ酸、又は酢酸等のカルボン酸類が挙
10 げられる。

触媒としては、例えば過酸化ベンゾイル、 α, α -アゾビスイソブチロニトリル又はこれらの混合物が挙げられる。

一般式〔4〕で表される化合物中の R^5 及び R^6 が水素原子のものである、一般式〔24〕で表される化合物は、以下の方法により製造することができる。



(式中、 X^1 及びYは前記と同じ意味を表す。)

一般式〔24〕で表される化合物は、Org. Synth., III, 557(1955)又はJ. Am. Chem. Soc., 72, 2216(1950)に記載の方法に準じて、化合物〔23〕とハロゲン
20 化水素とホルムアルデヒド又はパラホルムアルデヒドとを溶媒中、ルイス酸存在下もしくは非存在下で反応させるか、或いはJ. Am. Chem. Soc., 97, 6155(1975)に記載の方法に準じて、化合物〔23〕とハロゲノメチルエーテルとを溶媒中、ルイス酸存在下、反応させる方法により製造することができる。

この反応は通常、反応温度-40～150℃で10分～24時間行う。

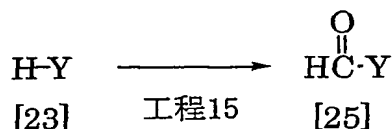
反応に供される試剤の量は、化合物〔23〕1当量に対して、ハロゲン化水素、ホルムアルデヒド、パラホルムアルデヒド、ルイス酸又はハロゲノメチルエーテル、1～2当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。

ルイス酸としては、例えば四塩化チタン、塩化亜鉛、塩化アルミニウム又は臭化亜鉛等が挙げられる。

ハロゲン化水素としては、塩化水素、臭化水素又はヨウ化水素が挙げられる。

溶媒としては、例えばジクロロエタン、四塩化炭素又はクロロホルム等のハロゲン化炭化水素類、ヘキサン又はヘプタン等の脂肪族炭化水素類、ジオキサン又はテトラヒドロフラン等のエーテル類、酢酸等のカルボン酸類、二硫化炭素或いはそれらの混合物が挙げられる。

一般式〔19〕で表される化合物中のR⁵が水素原子のものである、一般式〔25〕で表される化合物は、以下の方法により製造することができる。



15 (式中、Yは前記と同じ意味を表す。)

一般式〔25〕で表される化合物は、Org. Synth., IV, 831(1963)に記載のビルスマイヤー (Vilsmeier) 法に準じて、化合物〔23〕とN,N-ジメチルホルムアミドとを塩化ホスホリル、ホスゲン又は塩化チオニル存在下、溶媒中又は溶媒の非存在下で反応させるか、或いはChem. Ber., 93, 88(1960)に記載の方法に準じて、化合物〔23〕とジハロゲノメチルエーテルとを溶媒中、ルイス酸存在下、反応させた後、加水分解させる方法により製造することができる。

この反応は通常、反応温度-40～150℃で10分～24時間行う。

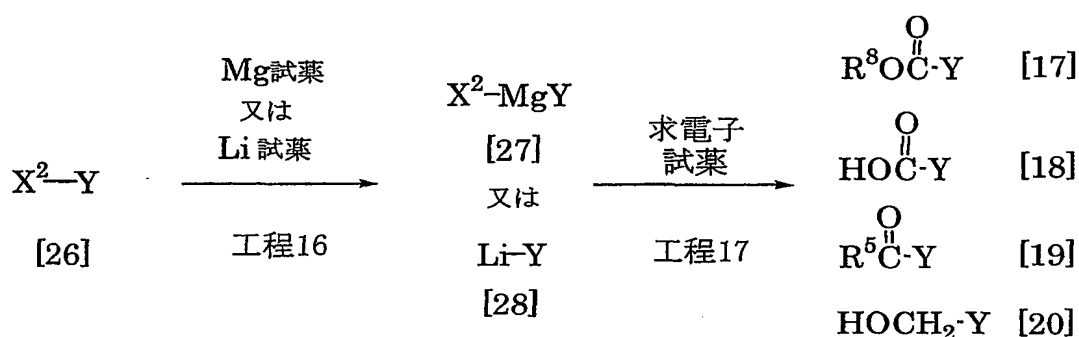
反応に供される試剤の量は、化合物〔23〕1当量に対して、塩化ホスホリル、

ホスゲン、塩化チオニル、N, N-ジメチルホルムアミド、ルイス酸又はジハロゲンメチルエーテル1～2当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。

ルイス酸としては、例えば四塩化チタン、四塩化スズ、塩化亜鉛、塩化アルミニウム又は臭化亜鉛等が挙げられる。

溶媒としては、例えばジクロロエタン、四塩化炭素又はクロロホルム等のハロゲン化炭化水素類、ヘキサン又はヘプタン等の脂肪族炭化水素類、ジオキサン又はテトラヒドロフラン等のエーテル類、酢酸等のカルボン酸類、N, N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、二硫化炭素或いはそれらの混合物が挙げられる。

10 一般式〔17〕、〔18〕、〔19〕及び〔20〕で表される化合物は、以下の方法により製造することができる。



15 (式中、R⁵, R⁸及びYは前記と同じ意味を表し、X²は塩素原子、臭素原子又はヨウ素原子を表す。)

一般式〔17〕、〔18〕、〔19〕又は〔20〕で表される化合物は、J. Org. Chem., 65, 4618(2000)に記載方法に準じて、化合物〔26〕とマグネシウム試薬とを溶媒中又は溶媒の非存在下、反応させて化合物〔27〕を得た後、求電子試薬と反応させるか、或いはSynth. Commun., 24(2), 253(1994)に記載方法に準じて、
20 化合物〔26〕とn-ブチルリチウムとを溶媒中で反応させて化合物〔28〕を得

た後、求電子試薬と反応させる方法により製造することができる。

この反応は通常、反応温度 $-100\sim 150^{\circ}\text{C}$ で10分 \sim 24時間行う。

反応に供される試剤の量は、化合物[26] 1当量に対して、マグネシウム試薬又はリチウム試薬1 \sim 5当量、求電子試薬1 \sim 5当量が望ましいが、反応の状況に

5 応じて任意に変化させることができる。

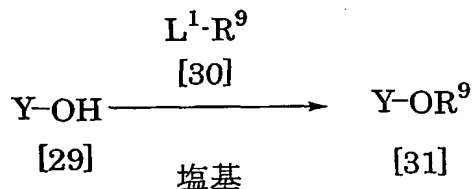
マグネシウム試薬としては、例えば金属マグネシウム、臭化イソプロピルマグネシウム又はジイソプロピルマグネシウム等が挙げられる。

リチウム試薬としては、例えばn-ブチルリチウム、sec-ブチルリチウム又はtert-ブチルリチウム等が挙げられる。

10 求電子試薬としては、例えばギ酸エチル、シアノギ酸エチル又は酢酸エチル等のエステル類、アセチルクロリド又はクロロギ酸メチル等の酸ハライド類、N,N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、パラホルムアルデヒド等のアルデヒド類、或いは二酸化炭素が挙げられる。

15 溶媒としては、例えばジクロロエタン、四塩化炭素又はクロロホルム等のハロゲン化炭化水素類、ヘキサン又はペンタン等の脂肪族炭化水素類、ジオキサン又はテトラヒドロフラン等のエーテル類、或いはそれらの混合物が挙げられる。

一般式[4]、[17]、[18]、[19]、[20]、[22]、[23]、[26]、[32]又は[34]で表される化合物中、一般式[31]で表される化合物は、以下の方法により製造することができる。



(式中、Yは前記と同じ意味を表し、 R^9 はアルキル基、ハロアルキル基、シクロアルキル基、シクロアルキルアルキル基、アルコキシカルボニルアルキル基、置換

- されていてもよいベンジル基、置換されていてもよいヘテロ環アルキル基、アルケ
ニル基、アルキニル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、置換
されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、
アシル基、ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル
5 基又は置換されていてもよいベンゾイル基を表し、 L^1 はハロゲン原子、 $C1\sim C4$
アルキルスルホナート基、 $C1\sim C4$ アルキルスルホニル基、置換されていてもよい
ベンジルスルホニル基、置換されていてもよいフェニルスルホナート基又は置換さ
れていてもよいベンジルスルホナート基等の脱離基を表す。但し、 R^9 がハロアル
キル基の場合は、 L^1 はハロアルキル化して残ったハロゲン原子より反応性の高い
10 脱離基を表す。例えば CHF_2 基の場合は塩素原子又は臭素原子を表し、 CH_2CF_3
基の場合は塩素原子、臭素原子、 p -トルエンスルホニルオキシ基又はメチルスル
ホニルオキシ基等を表す。)

一般式〔31〕で表される化合物は、化合物〔29〕と化合物〔30〕とを溶媒
中、塩基存在下で反応させることにより製造することができる。

- 15 この反応は通常、反応温度 $0\sim 120^\circ\text{C}$ で10分～24時間行う。

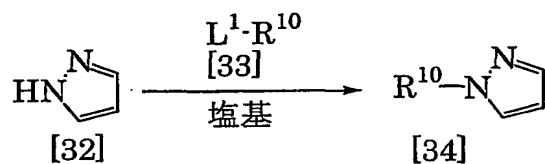
反応に供される試剤の量は、化合物〔29〕1当量に対して化合物〔30〕は1
～20当量、塩基は1～3当量である。

- 塩基としては、例えば炭酸ナトリウム又は炭酸カリウム等のアルカリ金属炭酸塩、
水酸化ナトリウム又は水酸化カリウム等のアルカリ金属水酸化物、水素化カリウム
20 又は水素化ナトリウム等アルカリ金属水素化物、ナトリウムエトキシド又はナトリ
ウムメトキシド等のアルカリ金属アルコラート、或いは1,8-ジアザビシクロ〔5.
4.0〕-7-ウンデセン等の有機塩基が挙げられる。

- 溶媒としては例えばジクロロメタン又はクロロホルム等のハロゲン化炭化水素
類、ジエチルエーテル又はテトラヒドロフラン等のエーテル類、ベンゼン又はトル
25 エン等の芳香族炭化水素類、ヘキサン又はヘプタン等の脂肪族炭化水素類、アセト

ン又はメチルイソブチルケトン等のケトン類、酢酸エチル又は酢酸メチル等のエステル類、N-メチルピロリドン又はN, N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、ジメチルスルホキシド又はスルホラン等の硫黄化合物、アセトニトリル等のニトリル類、或いはそれらの混合物が挙げられる。

- 5 一般式 [4]、[17]、[18]、[19]、[20]、[22]、[23]、[26]、[29] 又は [31] で表される化合物中、一般式 [34] で表される化合物は、以下の方法により製造することができる。



- 10 (式中、 L^1 は前記と同じ意味を表し、 R^{10} はアルキル基、前記と同じ意味の置換基群 β より選択される任意の基でモノ置換されたアルキル基、ハロアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルキルスルフィニル基、アルキルスルホニル基、前記と同じ意味の置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたアルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよいフェニル
- 15 スルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、アルコキシカルボニル基、置換されていてもよいベンジルオキシカルボニル基、置換されていてもよいフェノキシカルボニル基、カル
- 20 バモイル基 (該基の窒素原子は同一又は異なって、アルキル基又は置換されていてもよいフェニル基で置換されていてもよい) を表す。この場合、ピラゾール環の炭素原子は、前記と同じ意味の置換基群 α より選択される、1～2個の同一又は相異なる基で置換されていてもよい。)

一般式〔3 4〕で表される化合物は、化合物〔3 2〕と化合物〔3 3〕とを溶媒中、塩基存在下で反応させることにより製造することができる。

この反応は通常、反応温度 0～120℃で10分～24時間反応行う。反応に供される試剤の量は、化合物〔3 2〕1当量に対して化合物〔3 3〕は1～20当量、

5 塩基は1～3当量である。

塩基及び溶媒としては、例えば一般式〔2 9〕から一般式〔3 1〕の製造と同様なものが挙げられる。

Yにトリフルオロメチル基を導入する方法として、J.Chem. Soc. Perkin Trans. 1, 8, 2293-2299 (1990)、J. Fluorine Chem., 50(3), 411-426 (1990)、

- 10 J. Chem. Soc. Chem. Commun., 18, 1389-1391 (1993)、J. Chem. Soc. Chem. Commun., 1, 53-54 (1992)、Chem. Lett., 1719-1720 (1981)、Chem. Pharm. Bull., 38(9), 2446-2458 (1990)、J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1, 921-926 (1988)、Heterocycles, 37(2), 775-782 (1994)、Tetrahedron Lett., 30(16), 2133-2136 (1989)、J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1, 2755-2761 (1980)、Heterocycles, 22(1), 117-124 (1984)、
- 15 Eur. J. Med. Chem. Chim. Ther., 24, 249-258 (1989)、Acta Chem. Scand. Ser. B, 38(6), 505-508 (1984)、J. Fluorine Chem., 21, 495-514 (1982)、J. Chem. Soc. Chem. Commun., 10, 638-639 (1988)、J. Fluorine Chem., 67(1), 5-6 (1994)、J. Heterocycl. Chem., 31(6), 1413-1416 (1994)、Chem. Heterocycl. Compd., 30(5), 576-578 (1994)、J. Fluorine Chem., 78(2), 177-182 (1996)、J. Heterocycl. Chem.,
- 20 34(2), 551-556 (1997)、Tetrahedron, 55(52), 15067-15070 (1999)、Synthesis, 11, 932-933 (1980)に記載の方法又は準じた方法等が挙げられる

又、一般式〔4〕、〔1 7〕、〔1 8〕、〔1 9〕、〔2 0〕、〔2 1〕、〔2 2〕、〔2 3〕、〔2 4〕、〔2 5〕、〔2 6〕、〔2 9〕及び〔3 1〕は、

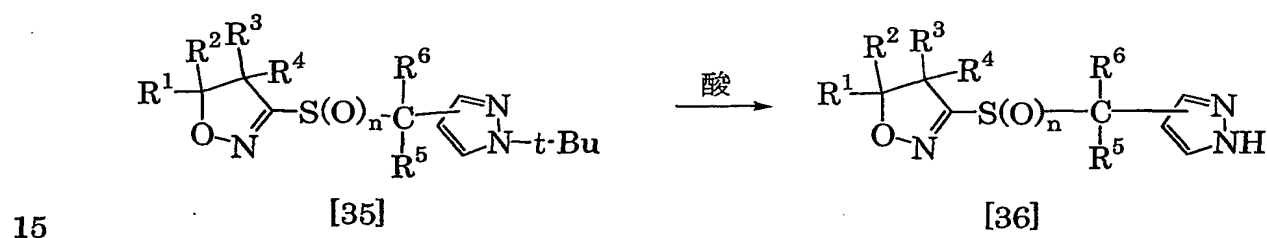
Yがフリル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E6a, 16-185 (1994)、Y

25 がチエニル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E6 a, 186-555(1994)、

- Yがピロリル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E6 a, 556-798(1994)、
Yがピラゾリル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E8 b, 399-
763(1994)、特開平2000-219679号公報、Yがイソキサゾリル基の場合はMethoden
der Organischen Chemie, E8a, 45-225(1993)、Yがイソチアゾリル基の場合は
5 Methoden der Organischen Chemie, E8a, 668-798(1993)、Yがオキサゾリル基の場
合はMethoden der Organischen Chemie, E8a, 891-1019(1993)、Yがチアゾリル基
の場合はMethoden der Organischen Chemie, E8 b, 1-398(1994)、Yがイミダゾリ
ル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E8 c, 1-215(1994)、Yがピリジ
ル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E7a, 286-686 (1992)、Yがピリ
10 ダジニル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E9a, 557-682(1997)、Yが
ピリミジニル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E9 b / 1, 1 -
249(1998)、Yがピラジニル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E9 b /
1, 250-372(1998)、Yがトリアジニル基の場合はMethoden der Organischen
Chemie, E9c, 530-796(1998)、Yがトリアゾリル基の場合はMethoden der Or-
15 ganischen Chemie, E8d, 305-405、479-598 (1994)、Yがオキサジアゾリル基の
場合はMethoden der Organischen Chemie, E8c, 397-818(1994)、Yがチアジアゾリ
ル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E8d, 59-304(1994)、Yがベンゾ
フリル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E6b1, 33-216 (1994)、国際
特許出願公開公報WO-1997/29105号、Yがベンゾチエニル基の場合はMethoden der
20 Organischen Chemie E6b1, 217-322 (1994)、Yがインドリル基の場合はMethoden
der Organischen Chemie, E6b1, 546-848 (1994)、Methoden der Organischen
Chemie, E6b2, 849-1336 (1994)、国際特許出願公開公報WO-1997/42188-A1号、Yが
ベンゾオキサゾリル基の場合はMethoden der Organischen Chemie, E8a, 1020-1194
(1993)、Yがベンゾチアゾリル基の場合はMethoden der Organischen Chemie,
25 E8b, 865-1062 (1994)、Yがベンゾイミダゾリル基の場合はMethoden der Or-

- ganischen Chemie, E8c, 216-391 (1994)、Yがベンゾイソキサゾリル基の場合は Methoden der Organischen Chemie, E8a, 226-348 (1993)、Yがベンゾイソチアゾリル基の場合は Methoden der Organischen Chemie, E8a, 799-852 (1993)、Yがインダゾリル基の場合は Methoden der Organischen Chemie, E8b, 764-864 (1994)、
- 5 Yがキノリル基の場合は Methoden der Organischen Chemie, E7a, 290-570 (1991)、Yがイソキノリル基の場合は Methoden der Organischen Chemie, E7a, 571-758 (1991)、Yがフサラジニル基の場合は Methoden der Organischen Chemie, E9a, 744-789 (1997)、Yがキノキサリニル基の場合は Methoden der Organischen Chemie, E9b/2, 93-265 (1998)、Yがキナゾリニル基の場合は Methoden
- 10 der Organischen Chemie, E9b/2, 1-192 (1998)、Yがシンノリニル基の場合は Methoden der Organischen Chemie, E9a, 683-743 (1997)、又、Yがベンゾトリアゾリル基の場合は Methoden der Organischen Chemie, E8d, 406-478 (1994) 記載の方法又はそれらに準じた方法等で製造することができる。

<製造法 2>



(式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 及び R^6 は前記と同じ意味を表す。この場合、ピラゾール環の炭素原子は、前記と同じ意味の置換基群 α より選択される、1～2個の同一又は相異なる基で置換されていてもよい。)

- 20 一般式 [36] で表される本発明化合物は、製造法 1 により製造することができる本発明化合物 [35] と酸とを溶媒中で反応させることにより、製造することができる。

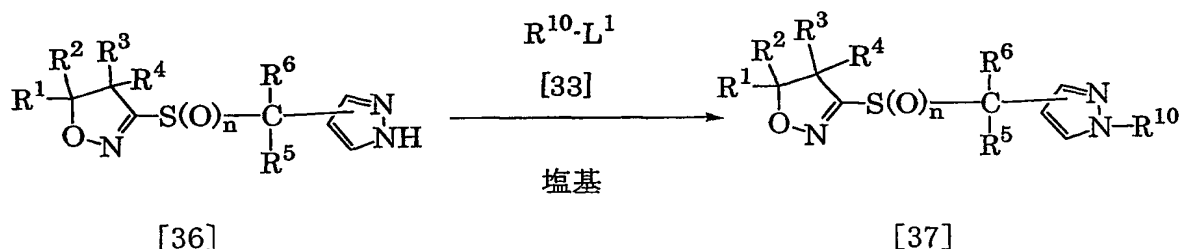
この反応は通常、反応温度 0～120℃で10分～24時間行う。

反応に供される試剤の量は、化合物 [35] 1 当量に対して、酸 1～10 当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。

酸としては、例えば塩酸、臭化水素酸、トリフルオロ酢酸等が挙げられる。

- 5 溶媒としては、例えばジクロロエタン、四塩化炭素、クロロベンゼン又はジクロロベンゼン等のハロゲン化炭化水素類、N, N-ジメチルアセトアミド、N, N-ジメチルホルムアミド又はN-メチル-2-ピロリジノン等のアミド類、ジメチルスルホキシド又はスルホラン等の硫黄化合物、ギ酸又は酢酸等のカルボン酸類或いは水が挙げられる。

10 <製造法 3>



(式中、n、L¹、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶及びR¹⁰は前記と同じ意味を表す。この場合、ピラゾール環の炭素原子は、前記と同じ意味の置換基群αより選択される、1～2個の同一又は相異なる基で置換されていてもよい。)

一般式 [37] で表される本発明化合物は、本発明化合物 [36] と一般式 [33] で表される化合物とを溶媒中、塩基存在下に反応させることにより製造することができる。

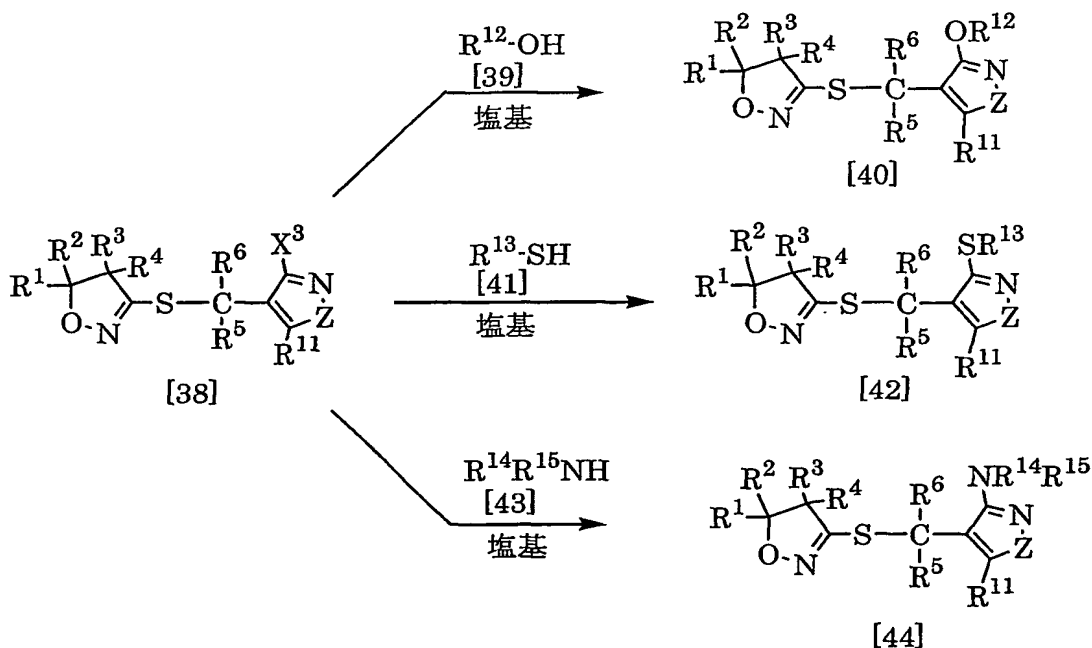
反応に供される試剤の量は、一般式 [36] で表される化合物 1 当量に対して、一般式 [33] で表される化合物は 1～3 当量であり、塩基は、1～3 当量である。

溶媒としては、例えばジオキサン又はテトラヒドロフラン (THF) 等のエーテル類、ジクロロエタン、四塩化炭素、クロロベンゼン又はジクロロベンゼン等のハ

- ロゲン化炭化水素類、N, N-ジメチルアセトアミド、N, N-ジメチルホルムアミド又はN-メチル-2-ピロリジノン等のアミド類、ジメチルスルホキシド又はスルホラン等の硫黄化合物、ベンゼン、トルエン又はキシレン等の芳香族炭化水素類、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、ブタノール又はtert-
5 -ブタノール等のアルコール類、アセトン又は2-ブタノン等のケトン類、アセトニトリル等のニトリル類、水或いはこれらの混合物が挙げられる。

- 塩基としては、例えば水素化ナトリウム等の金属水素化物、ナトリウムアミド又はリチウムジイソプロピルアミド等のアルカリ金属アミド類、ピリジン、トリエチルアミン又は1, 8-ジアザビシクロ [5. 4. 0] -7-ウンデセン等の有機塩基
10 類、水酸化ナトリウム又は水酸化カリウム等のアルカリ金属水酸化物、水酸化カルシウム又は水酸化マグネシウム等のアルカリ土類金属水酸化物、炭酸ナトリウム又は炭酸カリウム等のアルカリ金属炭酸塩類、炭酸水素ナトリウム又は炭酸水素カリウム等のアルカリ金属重炭酸塩、或いはナトリウムメトキシド又はカリウムtert-ブトキシド等の金属アルコラート等が挙げられる。

- 15 <製造法4>



- (式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 及び R^6 は前記と同じ意味を表し、 R^{11} は水素又は前記と同じ意味の置換基群 α を表し、 X^3 は塩素原子、フッ素原子、アルキルスルホニル基又は置換されていてもよいベンジルスルホニル基を表し、 R^{12} はアルキル基、ハロアルキル基、シクロアルキル基、シクロアルキルアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、アルコキシカルボニルアルキル基、置換されていてもよいヘテロ環アルキル基、又は置換されていてもよいベンジル基を表し、 R^{13} はアルキル基、ハロアルキル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、アルコキシカルボニルアルキル基又は置換されていてもよいベンジル基を表し、 R^{14} 及び R^{15} は同一又は異なって、水素原子、アルキル基、置換されていてもよいフェニル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいベンジルスルホニル基又

は置換されていてもよいフェニルスルホニル基を表し、Zは酸素原子、イオウ原子、
 $N=CR^{11a}$ 、 $CR^{11a}=N$ 、 $CR^{11a}=CR^{11b}$ 又は $N-R^{16}$ を表し、 R^{16} は水素原子又は
前記と同じ意味の R^{10} を表し、 R^{11a} 、 R^{11b} は R^{11} と同じ意味を表す。)

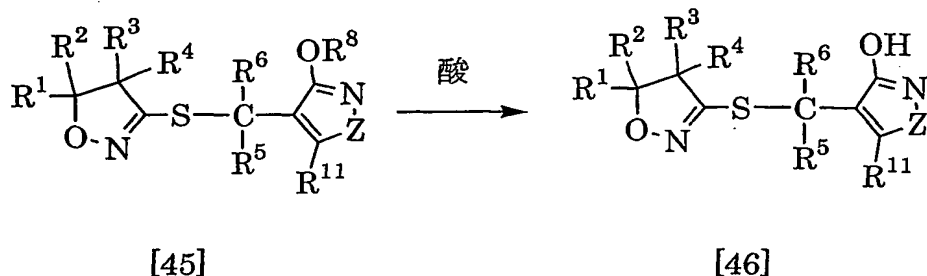
- 一般式[40]、一般式[42]又は一般式[44]で表される本発明化合物は、
5 一般式[38]で表される本発明化合物とそれぞれ化合物[39]、化合物[41]
又は化合物[43]とを無溶媒又は溶媒中、必要に応じ塩基存在下に反応させるこ
とにより製造することができる。

この反応は通常、反応温度20～200℃、好ましくは30～180℃で10分
～48時間、必要に応じ加圧下で行う。

- 10 反応に供される試剤の量は、化合物[38]1当量に対して、化合物[39]、
化合物[41]又は化合物[43]は1～20当量である。必要に応じて使用され
る塩基としては、例えば水酸化カリウム又は水酸化ナトリウム等のアルカリ金属水
酸化物、水素化カリウム又は水素化ナトリウム等アルカリ金属水素化物、ナトリウ
ムエトキシド又はナトリウムメトキシド等のアルカリ金属アルコラート、1,8-
15 ジアザビシクロ[5.4.0]-7-ウンデセン等の有機塩基が挙げられる。

- 溶媒としては例えばクロロホルム等のハロゲン化炭化水素類、ジエチルエーテル
又はテトラヒドロフラン等のエーテル類、ベンゼン又はトルエン等の芳香族炭化水
素類、ヘキサン又はヘプタン等の脂肪族炭化水素類、アセトン又はメチルイソブチ
ルケトン等のケトン類、酢酸エチル等のエステル類、N-メチルピロリドン又はN,
20 N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、ジメチルスルホキシド又はスルホラン等
の硫黄化合物、アセトニトリル或いはそれらの混合物が挙げられる。

<製造法5>



(式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^8 、 R^{11} 及び Z は前記と同じ意味を表す。)

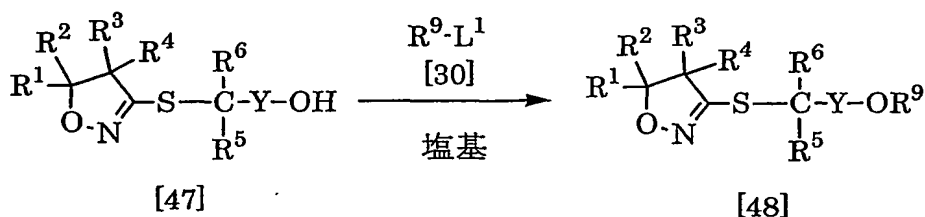
一般式[46]で表される本発明化合物は、本発明化合物[45]と酸とを溶媒
5 中で反応させることにより、製造することができる。

この反応は通常、反応温度0～120℃で10分～24時間行う。

反応に供される試剤の量は、化合物[45]1当量に対して、酸1～10当量が
望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。

酸及び溶媒としては、製造法2と同様なものが挙げられる。

10 <製造法6>



(式中、 Y 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^9 及び L^1 は前記と同じ意味を表す。

この場合、 Y は前記と同じ意味の置換基群 α より選択される、1～5個までの同一
15 又は相異なる基で置換されていてもよい。)

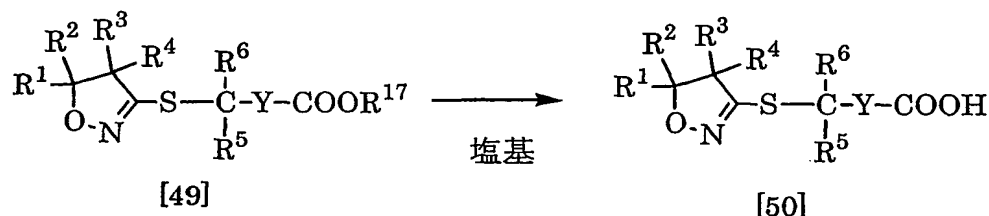
一般式[48]で表される本発明化合物は、本発明化合物[47]と化合物[3
0]とを溶媒中、塩基存在下に反応させることにより、製造することができる。

この反応は通常、反応温度0～150℃で10分～24時間行う。

反応に供される試剤の量は、化合物〔47〕1当量に対して、酸1～1.2当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。

塩基及び溶媒としては、製造法3と同様なものが挙げられる。

<製造法7>



(式中、Y、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵及びR⁶は前記と同じ意味を表し、R¹⁷はアルキル基、置換されていてもよいベンジル基又は置換されていてもよいフェニル基を表す。この場合、Yは前記と同じ意味の置換基群αより選択される、1～5個までの同一又は相異なる基で置換されていてもよい。)

一般式〔50〕で表される本発明化合物は、本発明化合物〔49〕を水又は水と混合した溶媒中、塩基存在下又は非存在下に加水分解させることにより、製造することができる。

この反応は通常、反応温度0～100℃で10分～24時間行う。

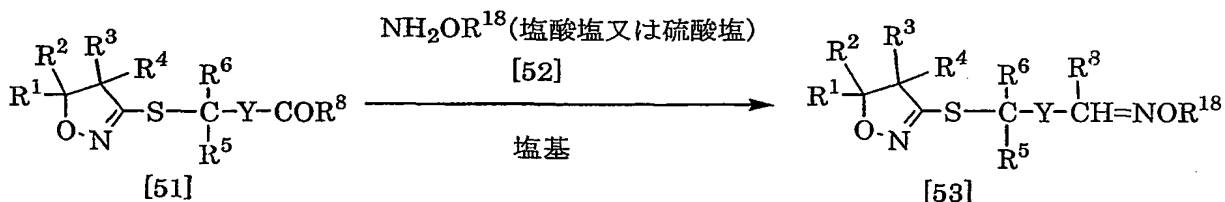
反応に供される試剤の量は、化合物〔49〕1当量に対して、塩基を使用する場合1～2当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。

塩基としては、例えば炭酸カリウム、水素化ナトリウム又は水酸化ナトリウム等の無機塩基、1,8-ジアザビシクロ〔5.4.0〕-7-ウンデセン等の有機塩基が挙げられる。

水と混合する溶媒としては、例えばメタノール又はエタノール等のアルコール類、テトラヒドロフラン等のエーテル類、アセトン又はメチルイソブチルケトン等のケトン類、N,N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、ジメチルスルホキシド又は

スルホラン等の硫黄化合物、アセトニトリル或いはそれらの混合物が挙げられる。

<製造法 8>



- 5 (式中、Y、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶及びR⁸は前記と同じ意味を表し、R¹⁸はアルキル基を表す。この場合、Yは前記と同じ意味の置換基群αより選択される、1～5個までの同一又は相異なる基で置換されていてよい。)

一般式[53]で表される本発明化合物は、本発明化合物[51]と化合物[52]とを溶媒中、塩基存在下に反応させることにより、製造することができる。

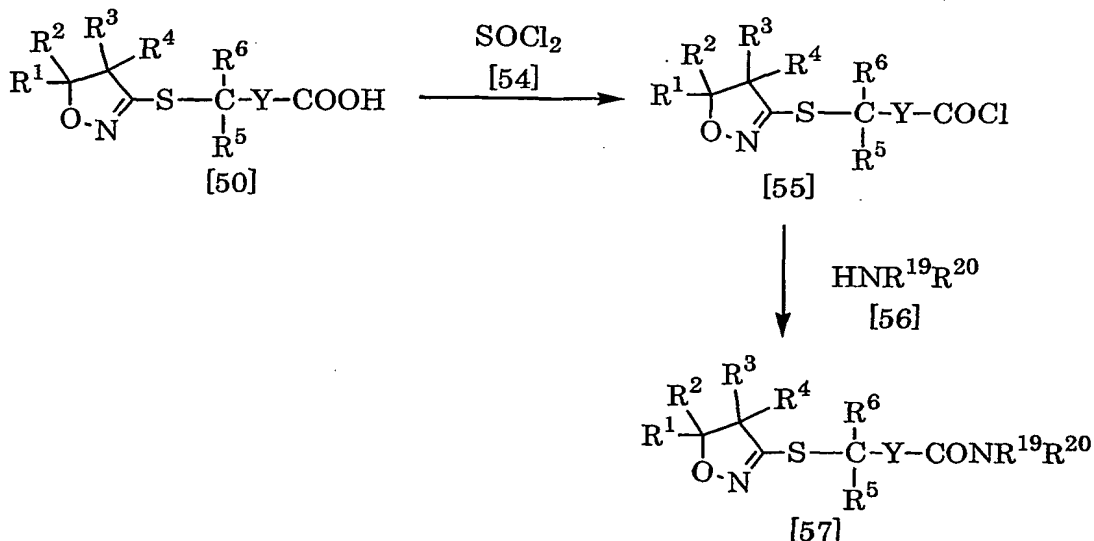
- 10 この反応は通常、反応温度0～100℃で10分～24時間行う。

反応に供される試剤の量は、化合物[51]1当量に対して、化合物[52]の塩酸塩又は硫酸塩1～5当量、塩基1～10当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。

- 15 塩基としては、例えば炭酸カリウム又は炭酸ナトリウム等の金属炭酸塩類、酢酸カリウム又は酢酸ナトリウム等の金属酢酸塩類、トリエチルアミン、ジメチルアミン又は1,8-ジアザビシクロ[5.4.0]-7-ウンデセン等の有機塩基が挙げられる。

- 20 溶媒としては、例えばメタノール、エタノール等のアルコール類、テトラヒドロフラン等のエーテル類、N,N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、水或いはそれらの混合物が挙げられる。

<製造法 9>



(式中、Y、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵及びR⁶は前記と同じ意味を表し、R¹⁹及びR²⁰は、各々、水素原子又はアルキル基を表す。この場合、Yは前記と同じ意味の置換基群αより選択される、1～5個までの同一又は相異なる基で置換されている。) 5

一般式[57]で表される本発明化合物は、本発明化合物[50]と塩化チオニル[54]とを溶媒中又は無溶媒中で反応させて化合物[55]を製造した後、化合物[55]と化合物[56]とを溶媒中又は無溶媒中で反応させることにより、 10 製造することができる。

[50]から[55]の反応は、通常、反応温度0～100℃で10分～24時間行う。

反応に供される試剤の量は、化合物[50]1当量に対して、塩化チオニル[54]1～100当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることが 15 できる。

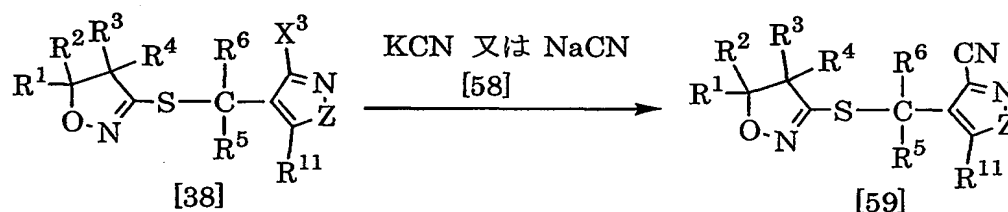
溶媒としては例えばジクロロメタン又はクロロホルム等のハロゲン化炭化水素類、ジエチルエーテル又はテトラヒドロフラン等のエーテル類、ベンゼン又はトル

エン等の芳香族炭化水素類が挙げられる。

[55] から [57] の反応は、通常、反応温度 0～100℃で10分～24時間行う。

反応に供される試剤の量は、化合物 [55] 1当量に対して、化合物 [56] は 1～100当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。溶媒としては例えば [50] から [55] の反応と同様なものが挙げられる。

<製造法10>



10 (式中、Z、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R¹¹及びX³は前記と同じ意味を表す。)

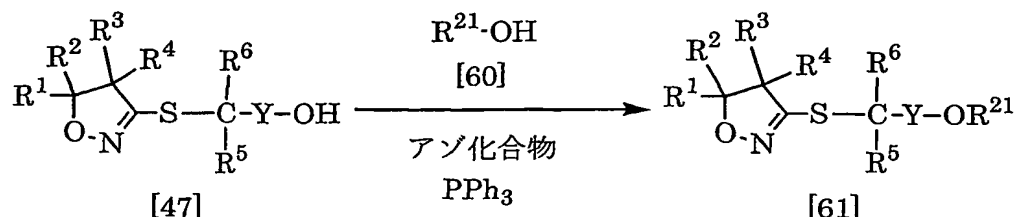
一般式 [59] で表される本発明化合物は、本発明化合物 [38] と化合物 [58] とを溶媒中で反応させることにより、製造することができる。

この反応は通常、反応温度 0～100℃で10分～24時間行う。

反応に供される試剤の量は、化合物 [38] 1当量に対して、化合物 [58] は 1～2当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。

溶媒としては、例えばジオキサン又はテトラヒドロフラン (THF) 等のエーテル類、ジクロロエタン、四塩化炭素、クロロベンゼン又はジクロロベンゼン等のハロゲン化炭化水素類、N,N-ジメチルアセトアミド、N,N-ジメチルホルムアミド又はN-メチル-2-ピロリジノン等のアミド類、ジメチルスルホキシド又はスルホラン等の硫黄化合物、アセトン又は2-ブタノン等のケトン類、アセトニトリル等のニトリル類、水或いはこれらの混合物が挙げられる。

<製造法11>



(式中、Y、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵及びR⁶は前記と同じ意味を表し、R²¹はアルキル基、ハロアルキル基、シクロアルキル基、シクロアルキルアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシカルボニルアルキル基、置換されていてもよいヘテロアルキル基、又は置換されていてもよいベンジル基を表す。この場合、Yは前記と同じ意味の置換基群αより選択される、1～5個までの同一又は相異なる基で置換されていてもよい。)

一般式〔61〕で表される本発明化合物は、本発明化合物〔47〕と化合物〔60〕とをアゾ化合物とトリフェニルホスフィンの存在下、溶媒中で反応させる公知の方法 (Synthesis, 1-28(1981)) に準じて製造することができる。

この反応は通常、反応温度0～100℃で10分～24時間行う。

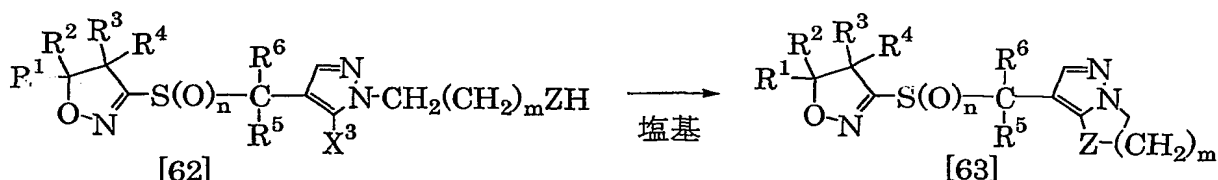
反応に供される試剤の量は、化合物〔47〕1当量に対して、化合物〔60〕1～1.5当量、アゾ化合物1～1.5当量、トリフェニルホスフィン1～1.5当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。

溶媒としては、例えばジオキサン又はテトラヒドロフラン (THF) 等のエーテル類、ジクロロエタン、四塩化炭素、クロロベンゼン又はジクロロベンゼン等のハロゲン化炭化水素類、N, N-ジメチルアセトアミド、N, N-ジメチルホルムアミド又はN-メチル-2-ピロリジノン等のアミド類、ジメチルスルホキシド又はスルホラン等の硫黄化合物、ベンゼン、トルエン又はキシレン等の芳香族炭化水素類、アセトニトリル或いはこれらの混合物等が挙げられる。

アゾ化合物としては、例えばアゾジカルボン酸ジエチル又はアゾジカルボン酸ジ

イソプロピル等が挙げられる。

<製造法 1 2>



- 5 (式中、 X^3 、 n 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 及び Z は前記と同じ意味を表し、 m は1～4の整数を表す。この場合、ピラゾール環の3位の炭素原子は、前記と同じ意味の置換基群 α より選択される基で置換されていてもよい。)

一般式〔6 3〕で表される本発明化合物は、本発明化合物〔6 2〕を塩基存在下溶媒中で反応させることにより、製造することができる。

- 10 この反応は通常、反応温度0～120℃で10分～24時間行う。

反応に供される試剤の量は、一般式〔6 2〕で表される化合物1当量に対して、塩基1～3当量が望ましいが、反応の状況に応じて任意に変化させることができる。

塩基及び溶媒としては、製造法3と同様なものが挙げられる。

- 尚、製造法2及び製造法4～11記載のスルフィド化合物は、製造法1記載の方法で酸化することによりスルホキシド体及びスルホン化合物を製造することができる。更に、製造法2及び製造法4～11に記載されたスルフィド化合物の置換基 Y がC1～C10アルキルチオ基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルチオ基又はC1～C4ハロアルキルチオ基で置換されている場合、製造法1記載の方法に準じて、前記スルフィド化合物に対して等量から過剰
- 15 等量の酸化剤を加えることにより、置換基 Y 上の置換基（C1～C10アルキルチオ基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルチオ基又はC1～C4ハロアルキルチオ基）も同時に酸化され、これらの置換基のスルホキシド体及びスルホン化合物を製造することができる。
- 20

次に、実施例をあげて本発明化合物の製造法、製剤法及び用途を具体的に説明する。尚、本発明化合物の製造中間体の製造法も併せて記載する。

<実施例 1>

3-(5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール
5 -4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン(本発明化合物
番号3-0001)の製造

5,5-ジメチル-3-メチルスルホニル-2-イソオキサゾリン2.3g(13.
1ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド20ml溶液に、水酸化ナトリウム水
和物2.1g(純度70%、26.2ミリモル)を加え2時間攪拌した。その後、無水
10 炭酸カリウム1.8g(13.1ミリモル)、ロンガリット2.0g(13.1ミリモル)
及び4-ブロモメチル-5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-
1H-ピラゾール3.6g(10.5ミリモル)を加え、更に室温で15時間攪拌した。
反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩
水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣を
15 シリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)
で精製し、白色結晶(融点89~90℃)の3-(5-クロロ-1-フェニル-3-
トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメ
チル-2-イソオキサゾリン2.7g(収率65.5%)を得た。

¹H-NMR(CDCl₃/TMS, δ (ppm)) : 7.55-7.50(5H, m), 4.33(2H, s), 2.83(2H, s),
20 1.45(6H, s)

<実施例 2>

3-(5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール
-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン(本発
明化合物番号3-0002)の製造

25 3-(5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール

- ー4-イルメチルチオ)ー5,5-ジメチルー2-イソオキサゾリン0.4 g (1.0ミリモル)のクロロホルム15 ml 溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息香酸0.63 g (純度70%、2.6ミリモル)を加え、室温で22時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、析出した結晶をヘキサンで洗浄し、白色結晶 (融点132~133℃) の3-(5-クロロ-1-フェニルー3-トリフルオロメチルー1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)ー5,5-ジメチルー2-イソオキサゾリン0.4 g (収率83.2%)を得た。
- 10 ¹H-NMR(CDCl₃/TMS, δ (ppm)): 7.60-7.51(5H, m), 4.73(2H, s), 3.14(2H, s), 1.53(6H, s)

<実施例3>

- 3-(5-クロロ-1-メチルー3-フェニルー1H-ピラゾール-4-イルメチルスルフィニル)ー5,5-ジメチルー2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号3-0003) の製造
- 15

- 3-(5-クロロ-1-メチルー3-フェニルー1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)ー5,5-ジメチルー2-イソオキサゾリン0.85 g (2.53ミリモル)のクロロホルム30 ml 溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息香酸0.87 g (純度70%、3.54ミリモル)を加え、室温で1時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、透明アメ状物質の3-(5-クロロ-1-メチルー3-フェニルー1H-ピラゾール-4-イルメチルスルフィニル)ー5,5-ジメチルー2-イソオキサゾリン0.48 g (収率53.2%)を得た。
- 20
- 25

9%)を得た。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3/TMS , δ (ppm)): 7.63–7.60 (2H, m), 7.48–7.37 (3H, m), 4.29 (2H, q), 3.91 (3H, s), 3.12 (1H, d), 2.79 (1H, d), 1.41 (3H, s), 1.35 (3H, s)

<実施例 4>

5 5,5-ジメチル-3-(5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号 3-0021) の製造

5,5-ジメチル-3-メチルスルホニル-2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号 2-1) 18.7 g (105.7 ミリモル) の N,N -ジメチルホルムアミド 300 ml 溶液に、水酸化ナトリウム水和物 9.3 g (純度 70%、116.3 ミリモル) を加え 2 時間攪拌した。反応系を氷冷し、4-ブロモメチル-5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール 30.3 g (93.8 ミリモル) の N,N -ジメチルホルムアミド 200 ml 溶液を加え、更に 0°C で 30 分間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒: ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒) で精製し、黄色油状物質の 5,5-ジメチル-3-(5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン 13.11 g (収率 37.4%) を得た。

15 ($^1\text{H-NMR}$ 値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)): 7.65–7.39 (5H, m), 4.24 (2H, s), 2.81 (2H, s), 1.43 (6H, s)

20

<実施例 5>

5,5-ジメチル-3-(5-エチルチオ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号 3-0022) の製造

25

エタンチオール 0.25 g (4.0 ミリモル) の N, N-ジメチルホルムアミド 10 ml 溶液に、水酸化ナトリウム 0.2 g (4.0 ミリモル)、水 1 ml を加え、室温で 30 分間攪拌した。5, 5-ジメチル-3-(5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソキサゾリン 0.5 g (1.4 ミリモル) の N, N-ジメチルホルムアミド 5 ml 溶液を加え、更に 1 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、5, 5-ジメチル-3-(5-エチルチオ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソキサゾリン 0.6 g (収率 100%) を得た。

¹H-NMR 値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 7.62-7.47 (5H, m), 4.44 (2H, s), 2.83 (2H, s), 2.50 (2H, q), 1.45 (6H, s), 1.02 (3H, t)

<実施例 6>

5, 5-ジメチル-3-(5-エチルスルホニル-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-2-イソキサゾリン (本発明化合物番号 3-0004) の製造

5, 5-ジメチル-3-(5-エチルチオ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソキサゾリン 0.6 g (1.3 ミリモル) のクロロホルム 10 ml 溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息香酸 1.7 g (純度 70%、6.7 ミリモル) を加え、室温で 16 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、析出した結晶をヘキサンで洗浄し、淡黄色結晶 (融点 158~160℃) の 5, 5-ジメチル-3-(5-エチルスルホニル-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-

イルメチルスルホニル) - 2-イソオキサゾリン 0.6 g (収率 93.0%) を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 7.58-7.54 (5H, m), 5.16 (2H, s), 3.18 (2H, s), 3.15 (2H, q), 1.55 (6H, s), 1.24 (3H, t)

<実施例 7>

- 5 5, 5-ジメチル-3-(5-ジメチルアミノ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ) - 2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号 3-0023) の製造

- 5, 5-ジメチル-3-(5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ) - 2-イソオキサゾリン 0.5 g
10 (1.3ミリモル) のN,N-ジメチルホルムアミド 10 ml 溶液に、ジメチルアミン 40%水溶液 0.8 g (6.7ミリモル) を加え、封管で 100℃で 9時間攪拌した。ジメチルアミン 40%水溶液 3.0 g (26.6ミリモル) を加え、更に 9時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去
15 し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒: ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、5, 5-ジメチル-3-(5-ジメチルアミノ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ) - 2-イソオキサゾリン 0.4 g (収率 80.6%) を得た。

- (¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 7.58-7.38 (5H, m), 4.35 (2H, s), 2.82 (2H, s),
20 2.77 (6H, s), 1.45 (6H, s)

<実施例 8>

5, 5-ジメチル-3-(5-ジメチルアミノ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル) - 2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号 3-0005) の製造

- 25 5, 5-ジメチル-3-(5-ジメチルアミノ-1-フェニル-3-トリフルオ

- ロメチルー1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン0.4 g (1.1ミリモル)のクロロホルム10ml溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息香酸0.7 g (純度70%、2.7ミリモル)を加え、室温で20時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、析出した結晶をヘキサンで洗浄し、白色粉末 (融点150~151℃) の5,5-ジメチルー3-(5-ジメチルアミノ-1-フェニルー3-トリフルオロメチルー1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-2-イソオキサゾリン0.2 g (収率52.0%)を得た。
- 10 (¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 7.61-7.38 (5H, m), 4.75 (2H, s), 3.13 (2H, s), 2.76 (6H, s), 1.53 (6H, s)

<実施例9>

- 3-(1-tert-ブチルー5-クロロ-3-トリフルオロメチルー1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチルー2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号3-0006) の製造
- 15

- 5,5-ジメチルー3-メチルスルホニルー2-イソオキサゾリン24.1 g (136.0ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド200ml溶液に、水酸化ナトリウム21.8 g (純度70%、272.5ミリモル)を加え1時間攪拌した。その後、無水炭酸カリウム18.8 g (136.2ミリモル), ロンガリット21.0 g (136.2ミリモル)を加え、更に2時間攪拌後、4-ブロモメチルー1-tert-ブチルー5-クロロ-3-トリフルオロメチルー1H-ピラゾール40 g (125ミリモル)を氷冷下加えた。その後、室温で2時間攪拌し、反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒: ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒) で精製し、淡桃色結
- 20
- 25

晶(融点79.0~81.0℃)の3-(1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン23.0g(収率57.1%)を得た。

(¹H-NMR値(CDCl₃/TMS δ(ppm)): 4.24(2H, s), 2.80(2H, s), 1.71(9H, s), 1.43(6H,

5 s)

<実施例10>

3-(5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号3-0007)の製造

- 10 3-(1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン19.8g(53.4ミリモル)を25%臭化水素-酢酸溶液170mlに加え、40~50℃で、2時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。
- 15 減圧下溶媒を留去し、淡黄色結晶(融点120.0~122.0℃)の3-(5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン12.0g(収率60.6%)を得た。

(¹H-NMR値(CDCl₃/TMS δ(ppm)): 4.26(2H, s), 2.81(2H, s), 1.44(6H, s)

<実施例11>

- 20 3-(5-クロロ-1-ジフルオロメチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号3-0008)及び3-(3-クロロ-1-ジフルオロメチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号3-0009)の製造

- 25 3-(5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチル

ルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 2.3 g (7.3ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド 50 ml 溶液に、無水炭酸カリウム 3.1 g (22.5ミリモル)を加え、クロロジフルオロメタンを反応溶液に吹き込み、130~140℃で3時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。

- 5 得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、淡黄色結晶(融点 41.0~42.0℃)の3-(5-クロロ-1-ジフルオロメチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 0.69 g
- 10 (収率 25.8%)および白色粉末(融点 89.0~90.0℃)の3-(3-クロロ-1-ジフルオロメチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 0.54 g (収率 20.2%)を得た。

- 3-(5-クロロ-1-ジフルオロメチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン
- 15 (¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)): 7.22 (1H, t), 4.25 (2H, s), 2.80 (2H, s), 1.44 (6H, s)

- 3-(3-クロロ-1-ジフルオロメチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン
- 20 (¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)): 7.19 (1H, t), 4.28 (2H, s), 2.80 (2H, s), 1.44 (6H, s)

<実施例 12>

- 3-(5-クロロ-1-ジフルオロメチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン
- 25 (本発明化合物番号 3-0010) の製造

3-(5-クロロ-1-ジフルオロメチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピ
ラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 0.6
9 g (1.9 ミリモル) のクロロホルム 20 ml 溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息
香酸 1.4 g (純度 70%, 8.1 ミリモル) を加え 1 時間攪拌した。その後、更に
5 室温で 12 時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎクロロホルムで抽
出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶
液、水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶
媒を留去し、得られた固体を n-ヘキサンで洗浄し、白色粉末(融点 126.0~1
27.0℃) の 3-(5-クロロ-1-ジフルオロメチル-3-トリフルオロメチル
10 -1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソ
オキサゾリン 0.4 g (収率 53.3%) を得た。

(¹H-NMR 値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 7.26 (1H, t), 4.68 (2H, s), 3.11 (2H, s), 1.53 (6H, s)

<実施例 13>

15 3-(3-クロロ-1-ジフルオロメチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピ
ラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリ
ン (本発明化合物番号 3-0011) の製造

3-(3-クロロ-1-ジフルオロメチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピ
ラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 0.5
20 4 g (1.5 ミリモル) のクロロホルム 20 ml 溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息
香酸 1.1 g (純度 70%, 6.4 ミリモル) を加え 1 時間攪拌した。その後、更に
室温で 12 時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎクロロホルムで抽
出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶
液、水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶
25 媒を留去し、得られた固体を n-ヘキサンで洗浄し、白色粉末(融点 136.0~1

37.0°C)の3-(3-クロロ-1-ジフルオロメチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン0.47g(収率79.7%)を得た。

(¹H-NMR値(CDC1₃/TMS δ(ppm)) : 7.23(1H, t), 4.71(2H, s), 3.11(2H, s), 1.53(6H, s)

<実施例14>

5,5-ジメチル-3-(3-メトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号3-0024)の製造

- 10 5,5-ジメチル-3-エチルスルホニル-2-イソオキサゾリン3.3g(17.3ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド10ml溶液に、水酸化ナトリウム水和物3.1g(純度70%、22.0ミリモル)を加え2時間攪拌した。その後、無水炭酸カリウム3.1g(22.0ミリモル)、ロンガリット2.7g(17.5ミリモル)及び4-クロロメチル-3-メトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-
- 15 1H-ピラゾール4.0g(17.5ミリモル)を加え、更に室温で2時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、5,5-ジメチル-3-(3-メトキシ-1-メチル-5-トリフルオロ-
- 20 メチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン2.8g(収率52.0%)を得た。

<実施例15>

- 5,5-ジメチル-3-(3-ヒドロキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン(本発明化
- 25 合物番号3-0025)の製造

25%臭化水素酸酢酸溶液20mlに5,5-ジメチル-3-(3-メトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン3.3g(10.6ミリモル)を加え、50℃で3時間攪拌した。反応終了後、反応溶液減圧下溶媒を留去し、得られた残渣を水中に注いだ。析出した結晶を濾取し水洗後乾燥し、目的とする5,5-ジメチル-3-(3-ヒドロキシー-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン3.1g(収率96.0%)を得た。

<実施例16>

5,5-ジメチル-3-(3-エトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号3-0026)の製造

5,5-ジメチル-3-(3-ヒドロキシー-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン0.30g(1.0ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド10ml溶液に無水炭酸カリウム0.20g(1.3ミリモル)及びヨウ化エチル0.20g(1.5ミリモル)を加え、50℃で3時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、目的とする5,5-ジメチル-3-(3-エトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン0.30g(収率92.0%)を得た。

<実施例17>

5,5-ジメチル-3-(3-エトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号3-0012)の製造

5,5-ジメチル-3-(3-エトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル

ー1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン0.30 g
(0.92ミリモル)のクロロホルム10ml溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息香
酸0.68 g (純度70%、2.76ミリモル)を加え、室温で5時間攪拌した。反応
終了後、反応溶液を水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸
5 水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液及び食塩水で順次洗浄した後、
無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、析出した結晶をヘキサン
で洗浄し、白色結晶 (融点124~125℃) の5,5-ジメチル-3-(3-エト
キシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチ
ルスルホニル)-2-イソオキサゾリン0.24 g (収率73.0%)を得た。

- 10 (¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.50 (2H, s), 4.27 (2H, q), 3.86 (3H, s),
3.04 (2H, s), 1.49 (6H, s), 1.39 (3H, t)

<実施例18>

5,5-ジメチル-3-(5-フルオロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル
ー1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン (本発明化合
15 物番号3-0027)の製造

5,5-ジメチル-3-メチルスルホニル-2-イソオキサゾリン21.3 g (1
20.3ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド200ml溶液に、水酸化ナト
リウム19.3 g (純度70%、344.6ミリモル)を加え1時間攪拌した。その後、
無水炭酸カリウム16.7 g (121.0ミリモル), ロンガリット18.6 g (120.
20 7ミリモル)を加え、更に2時間攪拌後、4-ブロモメチル-5-フルオロ-1-
メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール31.4 g (120.3ミリ
モル)を氷冷下加えた。その後、室温で2時間攪拌し、反応終了確認後、反応溶液
を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、
無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、黄色油状物の5,5-ジ
25 メチル-3-(5-フルオロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラ

ゾールー４－イルメチルチオ)－２－イソオキサゾリン 29.0 g (収率 90.3%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.24(2H, s), 3.90(3H, s), 2.78(2H, s), 1.42(6H, s)

5 <実施例 19>

5,5－ジメチルー３－(５－メトキシ－１－メチルー３－トリフルオロメチルー１H－ピラゾールー４－イルメチルチオ)－２－イソオキサゾリン (本発明化合物番号 3-0028) の製造

5,5－ジメチルー３－(５－フルオロ－１－メチルー３－トリフルオロメチルー１H－ピラゾールー４－イルメチルチオ)－２－イソオキサゾリン 0.5 g (1.6ミリモル) のメタノール 20 ml 溶液に、ナトリウムメトキシド 0.77 g (4.0ミリモル, 28%メタノール溶液) を加え、還流下、4時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、黄色油状物の 5,5－ジメチルー３－(５－メトキシ－１－メチルー３－トリフルオロメチルー１H－ピラゾールー４－イルメチルチオ)－２－イソオキサゾリン 0.5 g (収率 96.7%) を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.26(2H, s), 4.07(3H, s), 3.72(3H, s), 2.80(2H, s), 1.43(6H, s)

20 <実施例 20>

5,5－ジメチルー３－(５－メトキシ－１－メチルー３－トリフルオロメチルー１H－ピラゾールー４－イルメチルスルホニル) ２－イソオキサゾリン (本発明化合物番号 3-0013) の製造

5,5－ジメチルー３－(５－メトキシ－１－メチルー３－トリフルオロメチルー１H－ピラゾールー４－イルメチルチオ)－２－イソオキサゾリン 0.5 g (1.

- 5 ミリモル)のクロロホルム20 ml 溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息香酸1.3 g (純度70%, 7.5ミリモル)を加え1時間攪拌した。その後、更に室温で12時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液、水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、得られた固体をn-ヘキサンで洗浄し、白色粉末(融点113.0~114.0℃)の5,5-ジメチル-3-(5-メトキシ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-2-イソオキサゾリン0.31 g (収率58.2%)を得た。
- 10 $^1\text{H-NMR}$ 値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) : 4.60(2H, s), 4.11(3H, s), 3.79(3H, s), 3.10(2H, s), 1.51(6H, s)

<実施例21>

- 3-(5-(2-クロロフェノキシ)-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン
- 15 ン(本発明化合物番号3-0029)の製造
- 2-クロロフェノール0.44 g (3.4ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド30 ml 溶液に、水素化ナトリウム0.2 g (8.3ミリモル, 純度60%)を氷冷下に加え、1時間攪拌した後、更に5,5-ジメチル-3-(5-フルオロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-
- 20 イソオキサゾリン0.7 g (2.2ミリモル)を加え、120~130℃で5時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、黄色油状物の3-(5-(2-クロロフェノキシ)-1-
- 25 メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,

5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 0.63 g (収率 66.7%) を得た。

<実施例 22>

3-(5-(2-クロロフェノキシ)-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1
H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソオキ
5 サゾリン (本発明化合物番号 3-0014) の製造

3-(5-(2-クロロフェノキシ)-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1
H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリ
ン 0.63 g (1.5 ミリモル) のクロロホルム 20 ml 溶液に、氷冷下、m-クロロ
過安息香酸 1.0 g (純度 70%, 5.8 ミリモル) を加え 1 時間攪拌した。その後、
10 更に室温で 12 時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎクロロホルム
で抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム
水溶液、水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧
下溶媒を留去し、得られた固体を n-ヘキサンで洗浄し、白色粉末 (融点 67.0 ~
70.0 °C) の 3-(5-(2-クロロフェノキシ)-1-メチル-3-トリフルオロ
15 メチル-1 H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-
イソオキサゾリン 0.31 g (収率 45.7%) を得た。

(¹H-NMR 値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 7.50-6.91 (4H, m), 4.45 (2H, s), 3.71 (3H, s),
3.03 (2H, s), 1.47 (6H, s)

<実施例 23>

20 3-(5-シクロペンチルオキシ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1 H-
ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン
(本発明化合物番号 3-0030) の製造

トリフェニルホスフィン 0.43 g (1.6 ミリモル) のベンゼン 10 ml 溶液に
シクロペンタノール 0.14 g (1.6 ミリモル), 5,5-ジメチル-3-(5-ヒド
25 ロキシ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1 H-ピラゾール-4-イルメ

チルチオ) - 2-イソオキサゾリン 0.5 g (1.6 ミリモル), 及びアゾジカルボン酸ジエチルエステル 0.7 g (40%トルエン溶液, 1.6 ミリモル)を加え、室温で12時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。

- 5 減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、無色透明油状物の3-(5-シクロペンチルオキシ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 0.52 g (収率85.2%)を得た。

10 <実施例24>

3-(5-シクロペンチルオキシ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号3-0015)の製造

- 3-(5-シクロペンチルオキシ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-
15 -ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン
0.52 g (1.4 ミリモル)のクロロホルム20 ml 溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息香酸0.85 g (純度70%, 4.9 ミリモル)を加え1時間攪拌した。その後、更に室温で12時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム
20 水溶液、水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、得られた固体をn-ヘキサンで洗浄し、白色粉末(融点113.0~114.0℃)の3-(5-シクロペンチルオキシ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 0.2 g (収率35.5%)を得た。

- 25 (¹H-NMR値(CDCl₃/TMS δ (ppm)): 5.03(1H, br), 4.60(2H, s), 3.73(3H, s), 3.05(2H,

s), 1.88–1.70 (8H, m), 1.50 (6H, s)

<実施例 25>

3-(5-シアノ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号 3-0031) の製造

5,5-ジメチル-3-(5-フルオロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン 0.5 g (1.6 ミリモル) の N,N-ジメチルホルムアミド 3.0 ml 溶液にシアン化ナトリウム 0.2 g (4.0 ミリモル) を加え、40℃で1時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、黄色油状物の 3-(5-シアノ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリンの粗化合物 0.9 g を得た。
(¹H-NMR 値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.30 (2H, s), 4.08 (3H, s), 2.81 (2H, s), 1.43 (6H, s)

<実施例 26>

3-(5-シアノ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号 3-0016) の製造

3-(5-シアノ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 0.9 g (粗化合物) のクロロホルム 50 ml 溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息香酸 2.1 g (純度 70%, 12.2 ミリモル) を加え1時間攪拌した。その後、更に室温で12時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液、水及び食塩

水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、得られた固体をn-ヘキサンで洗浄し、白色粉末(融点105.0~108.0℃)の3-(5-シアノ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン0.43g(収率76.4%)を得た。

(¹H-NMR値(CDCl₃/TMS δ(ppm)) : 4.73(2H, s), 4.16(3H, s), 3.14(2H, s), 1.53(6H, s)

<実施例27>

3-(3,5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号3-0032)の製造

5,5-ジメチル-3-エチルスルホニル-2-イソオキサゾリン0.7g(3.7ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド30ml溶液に、水酸化ナトリウム0.6g(純度70%、10.7ミリモル)を加え1時間攪拌した。その後、無水炭酸カリウム0.51g(3.7ミリモル), ロングリット0.56g(3.6ミリモル)を加え、更に2時間攪拌後、4-ブロモメチル-3,5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール0.9g(3.5ミリモル)を氷冷下加えた。その後、室温で2時間攪拌し、反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、無色透明油状物の3-(3,5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン0.8g(収率70.8%)を得た。

(¹H-NMR値(CDCl₃/TMS δ(ppm)) : 4.14(2H, s), 4.14(2H, q), 2.81(2H, s), 1.43(6H, s), 1.42(3H, t)

<実施例 28>

3-(3,5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号3-0017)の製造

- 5 3-(3,5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン0.8g(2.6ミリモル)のクロロホルム20ml溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息香酸2.0g(純度70%,11.6ミリモル)を加え1時間攪拌した。その後、更に室温で12時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液、水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、得られた固体をn-ヘキサンで洗浄し、白色粉末(融点105.0~107.0℃)の3-(3,5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン0.41g(収率46.6%)を得た。
- 15 (¹H-NMR値(CDCl₃/TMS δ(ppm)): 4.48(2H, s), 4.19(2H, q), 3.05(2H, s), 1.51(6H, s), 1.45(3H, t)

<実施例 29>

3-(5-クロロ-3-ジフルオロメチル-1-メチル-1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号3-0020)の製造

- 20 5,5-ジメチル-3-エチルスルホニル-2-イソオキサゾリン1.9g(10.0ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド30ml溶液に、水酸化ナトリウム水和物1.2g(純度70%、15.0ミリモル)を加え2時間攪拌した。その後、無水炭酸カリウム2.1g(15.0ミリモル)、ロンガリット2.3g(15.0ミリモル)
- 25 及び4-ブロモメチル-5-クロロ-3-ジフルオロメチル-1-メチル-1H

ーピラゾール 2.6 g (10.0 ミリモル) を加え、更に室温で 15 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒: ヘキサンー酢酸エチル混合溶媒)

- 5 で精製し、無色粘稠性液体 ($n_D^{20}=1.5183$) の 3-(5-クロロ-3-ジフルオロメチルー1-メチルー1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチルー2-イソオキサゾリン 2.1 g (収率 68.0%) を得た。

($^1\text{H-NMR}$ 値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) : 6.70 (1H, t, $J=54.2\text{Hz}$), 4.24 (2H, s), 3.86 (3H, s), 2.80 (2H, s), 1.42 (6H, s)

10 <実施例 30>

3-(5-クロロ-3-ジフルオロメチルー1-メチルー1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチルー2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号 3-0018) の製造

- 3-(5-クロロ-3-ジフルオロメチルー1-メチルー1H-ピラゾール-4-イルメチルチオ)-5,5-ジメチルー2-イソオキサゾリン 1.8 g (5.8 ミリモル) のクロロホルム 15 ml 溶液に、氷冷下、 m -クロロ過安息香酸 3.6 g (純度 70%、14.5 ミリモル) を加え、室温で 22 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、析出した結晶をヘキサンで洗浄し、白色結晶 (融点 $78\sim 79^\circ\text{C}$) の 3-(5-クロロ-3-ジフルオロメチルー1-メチルー1H-ピラゾール-4-イルメチルスルホニル)-5,5-ジメチルー2-イソオキサゾリン 1.7 g (収率 85.9%) を得た。

- 20 ($^1\text{H-NMR}$ 値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) 6.80 (1H, t, $J=54.8\text{Hz}$), 4.60 (2H, s), 3.91 (3H, s), 3.08 (2H, s), 1.51 (6H, s)

<実施例 3 1>

5, 5-ジメチルー 3-(5-メチルー 3-トリフルオロメチルイソキサゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号 4-0003) の製造

- 5 5, 5-ジメチルー 3-メチルスルホニル-2-イソオキサゾリン 0.4 g (2.3 ミリモル) の N, N-ジメチルホルムアミド 10 ml 溶液に、水酸化ナトリウム水和物 0.4 g (純度 70%、4.6 ミリモル) を加え 2 時間攪拌した。その後、炭酸カリウム 0.3 g (2.3 ミリモル)、ロンガリット 0.4 g (2.3 ミリモル) 及び 4-プロモメチルー 5-メチルー 3-トリフルオロメチルイソキサゾール 0.5 g (1.8 ミリモル) を加え、更に室温で 14 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒: ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒) で精製し、5, 5-ジメチルー 3-(5-メチルー 3-トリフルオロメチルイソキサゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン 0.4 g (収率 70.0%) を得た。
- 10
- 15

(¹H-NMR 値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.11 (2H, s), 2.77 (2H, s), 2.54 (3H, s), 1.42 (6H, s)

<実施例 3 2>

- 5, 5-ジメチルー 3-(5-メチルー 3-トリフルオロメチルイソキサゾール-4-イルメチルスルホニル)-2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号 4-0001) の製造
- 20

- 5, 5-ジメチルー 3-(5-メチルー 3-トリフルオロメチルイソキサゾール-4-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン 0.4 g (1.3 ミリモル) のクロロホルム 10 ml 溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息香酸 0.8 g (純度 70%、3.2 ミリモル) を加え、室温で 4 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ
- 25

クロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、析出した結晶をヘキサンで洗浄し、白色結晶（融点 135 ~ 136 °C）の 5, 5-ジメチル-3-(5-メチル-3-トリフルオロメチルイソキサゾール-4-イルメチルスルホニル)-2-イソキサゾリン 0.4 g（収率 95.0%）を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.54 (2H, s), 3.11 (2H, s), 2.61 (3H, s), 1.52 (6H, s)

<実施例 33>

- 10 [(5-クロロ-3-メチル-イソチアゾール-4-イル)-メチルチオ]-5, 5-ジメチル-2-イソキサゾリン（本発明化合物番号 4-0004）の製造
- 5, 5-ジメチル-3-メチルスルホニル-2-イソキサゾリン 0.89 g (5.00 ミリモル) の N, N-ジメチルホルムアミド 10 ml 溶液に、室温で水酸化ナトリウム 0.82 g (純度 70%, 10.00 ミリモル) を加え 2 時間攪拌した。その後
- 15 反応溶液中に無水炭酸カリウム 0.70 g (5.00 ミリモル)、ロンガリット 0.78 g (5.00 ミリモル) 及び 5-クロロ-4-クロロメチル-3-メチルイソチアゾール 0.91 g (5.00 ミリモル) を加え、更に室温で一夜攪拌した。反応終了確認後、水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカ
- 20 ゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、[(5-クロロ-3-メチル-イソチアゾール-4-イル)-メチルチオ]-5, 5-ジメチル-2-イソキサゾリン 1.38 g (収率：定量的) を得た。

<実施例 34>

- [(5-クロロ-3-メチル-イソチアゾール-4-イル)-メチルスルホニル]-5, 5-ジメチル-2-イソキサゾリン（本発明化合物番号 4-0002）の
- 25

製造

[(5-クロロ-3-メチル-イソチアゾール-4-イル)-メチルチオ]-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 1.38 g (5.00ミリモル)のクロロホルム 20 ml 溶液に、m-クロロ過安息香酸 2.96 g (純度70%, 12.00ミリモル)を氷冷下に加え、1時間攪拌し、更に室温で一夜攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、淡黄色粉末 (融点 113~114℃) の[(5-クロロ-3-メチル-イソチアゾール-4-イル)-メチルスルホニル]-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 0.65 g (収率 47.0%)を得た。

¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) 8.89(1H, s), 4.67(2H, s), 3.05(2H, s), 2.59(3H, s), 1.51(6H, s)

<実施例 35>

5,5-ジメチル-3-[2,5-ジメチル-4-(1-メトキシイミノエチル)-チオフェン-3-イルメチルチオ]-2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号 2-0002) の製造

3-(4-アセチル-2,5-ジメチルチオフェン-3-イルメチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 1.0 g (3.4ミリモル)のエタノール 50 ml 溶液にO-メチルヒドロキシルアミン塩酸塩 0.57 g (6.8ミリモル)と酢酸ナトリウム 0.56 g (6.8ミリモル)を加え、還流下、5時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒: ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、黄色油状物の5,5-ジメチル-3-[2,5-ジメチル-4-(1-

メトキシイミノエチル)ーチオフェンー3ーイルメチルチオ]ー2ーイソオキサゾリン0.4 g (36.4%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.21 (2H, s), 3.95 (3H, s), 2.76 (2H, s), 2.38 (3H, s), 2.34 (3H, s), 2.13 (3H, s), 1.42 (6H, s)

5 <実施例36>

5,5ージメチルー3ー[2,5ージメチルー4ー(1ーメトキシイミノエチル)ーチオフェンー3ーイルメチルスルホニル]ー2ーイソオキサゾリン (本発明化合物番号2ー0001) の製造

5,5ージメチルー3ー[2,5ージメチルー4ー(1ーメトキシイミノエチル)ー
10 チオフェンー3ーイルメチルチオ]ー2ーイソオキサゾリン0.4 g (1.2ミリモル)のクロロホルム30 ml 溶液に、mークロロ過安息香酸0.61 g (純度70%, 3.5ミリモル) を氷冷下で加え1時間攪拌し、更に室温で12時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液、水及び食塩水で順次洗淨
15 した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサンー酢酸エチル混合溶媒)で精製し、白色結晶(融点95.0~96.0℃)の5,5ージメチルー3ー[2,5ージメチルー4ー(1ーメトキシイミノエチル)ーチオフェンー3ーイルメチルスルホニル]ー2ーイソオキサゾリン0.35 g (80%)を得た。

20 (¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.79 (2H, s), 3.95 (3H, s), 2.93 (2H, s), 2.42 (3H, s), 2.37 (3H, s), 2.17 (3H, s), 1.47 (6H, s)

<実施例37>

5,5ージメチルー3ー(4ートリフルオロメチルーピリジンー3ーイルメチルチオ)ー2ーイソオキサゾリン (本発明化合物番号7ー0003) の製造

25 5,5ージメチルー3ーエチルスルホニルー2ーイソオキサゾリン0.3 g (1.

6ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド20ml溶液に、水酸化ナトリウム0.26g(純度70%、4.6ミリモル)を加え1時間攪拌した。その後、無水炭酸カリウム0.22g(1.6ミリモル)、ロンガリット0.25g(1.6ミリモル)を加え、更に2時間攪拌後、3-ブロモメチルー4-トリフルオロメチルーピリジン0.3g(1.3ミリモル)を氷冷下加えた。その後、室温で2時間攪拌し、反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、黄色油状物の5,5-ジメチルー3-(4-トリフルオロメチルーピリジン-3-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン 0.45g(収率98.9%)を得た。

(¹H-NMR値(CDC1₃/TMS δ(ppm)):8.98(1H, s), 8.70(1H, d), 7.51(1H, d), 4.47(2H, s), 2.79(2H, s), 1.43(6H, s)

<実施例38>

5,5-ジメチルー3-(4-トリフルオロメチルーピリジン-3-イルメチルスルホニル)-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号7-0001)および5,5-ジメチルー3-(4-トリフルオロメチルーピリジン-N-オキシド-3-イルメチルスルホニル)-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号7-0002)の製造

5,5-ジメチルー3-(4-トリフルオロメチルーピリジン-3-イルメチルチオ)-2-イソオキサゾリン 0.45g(1.6ミリモル)のクロロホルム20ml溶液に、氷冷下、m-クロロ過安息香酸0.77g(純度70%、4.5ミリモル)を加え1時間攪拌した。その後、更に室温で12時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液、水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムク

ロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、淡黄色結晶(融点77.0~80.0℃)の5,5-ジメチル-3-(4-トリフルオロメチル-ピリジン-3-イルメチルスルホニル)-2-イソオキサゾリン0.06g(収率12.0%)および白色結晶(融点114.0~116.0℃)の5,5-ジメチル-3-(4-トリフルオロメチル-ピリジン-N-オキシド-3-イルメチルスルホニル)-2-イソオキサゾリン0.12g(収率23.1%)を得た。

5,5-ジメチル-3-(4-トリフルオロメチル-ピリジン-3-イルメチルスルホニル)-2-イソオキサゾリン

(¹H-NMR値(CDCl₃/TMS δ(ppm)): 8.98(1H, s), 8.84(1H, d), 7.64(1H, d), 4.92(2H, s), 3.09(2H, s), 1.52(6H, s)

5,5-ジメチル-3-(4-トリフルオロメチル-ピリジン-N-オキシド-3-イルメチルスルホニル)-2-イソオキサゾリン

(¹H-NMR値(CDCl₃/TMS δ(ppm)): 8.50(1H, s), 8.25(1H, d), 7.59(1H, d), 4.81(2H, s), 3.12(2H, s), 1.53(6H, s)

15 <実施例39>

5,5-ジメチル-[(4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-イル)-メチルチオ]-2-イソオキサゾリン(本発明化合物番号8-0002)の製造

5,5-ジメチル-3-メチルスルホニル-2-イソオキサゾリン0.35g(2.00ミリモル)のジメチルホルムアミド10ml溶液に、室温で水酸化ナトリウム0.32g(純度70%, 4.00ミリモル)を加え2時間攪拌した。その後反応溶液中に無水炭酸カリウム0.28g(2.00ミリモル)、ロンガリット0.31g(2.00ミリモル)及び5-クロロメチル-4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン0.45g(2.00ミリモル)を加え、更に室温で2時間攪拌した。反応終了確認後、水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順

次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、5,5-ジメチルー[(4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-イル)-メチルチオ]-2-イソオキサゾリン0.55 g (収率85.9%)を得た。

- 5 $^1\text{H-NMR}$ 値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) : 8.81 (1H, s), 4.44 (2H, d), 4.12 (3H, s), 2.81 (2H, s), 1.45 (6H, s)

<実施例40>

5,5-ジメチルー[(4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-イル)-メチルスルホニル]-2-イソオキサゾリン (本発明化合物番号8-000

10 1) の製造

5,5-ジメチルー[(4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-イル)-メチルチオ]-2-イソオキサゾリン0.55 g (1.71ミリモル)のクロロホルム20ml溶液に、氷冷下でm-クロロ過安息香酸1.05 g (純度70%, 4.28ミリモル)を加え1時間攪拌し、更に室温で4時間攪拌した。反応終了後、

- 15 反応溶液を水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、白色羽毛状結晶 (融点175~176℃) の5,5-ジメチルー[(4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-イル)-メチルスルホニル]-2-イソオキサゾリン0.45 g (収率75.0%)を得た。

20 $^1\text{H-NMR}$ 値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) : 8.89 (1H, s), 5.00 (2H, d), 4.11 (3H, s), 3.11 (2H, s), 1.53 (6H, s)

<実施例41>

- 25 3-(5,5-ジメチルー2-イソオキサゾリン-3-イルチオメチル)-2-トリフルオロメチルー6,7ジヒドロ-5H-ピラゾロ[5,1-b][1,3]オキサジ

ン（本発明化合物番号 3-0033）の製造

水素化ナトリウム 0.11 g (2.8 ミリモル) の N, N-ジメチルホルムアミド 15 ml 懸濁液に 3-[5-クロロ-1-(3-ヒドロキシプロピル)-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル-メチルチオ]-5,5-ジメチル-2-
5 イソオキサゾール 0.82 g (2.3 ミリモル) の N, N-ジメチルホルムアミド 5 ml 溶液を室温で滴下した。滴下終了後、反応溶液を室温で 30 分攪拌し、その後 100℃ に加熱し 1 時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層をクエン酸水溶液、食塩水で洗浄後、硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、3-(5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリ
10 ン-3-イルチオメチル)-2-トリフルオロメチル-6,7-ジヒドロ-5H-ピラゾロ[5,1-b][1,3]オキサジン 0.77 g (収率 100%) を得た。

(¹H-NMR 値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.37 (2H, t), 4.19 (2H, t), 4.15 (2H, s), 2.80 (2H, s), 2.31 (2H, m), 1.42 (6H, s)

<実施例 42>

15 3-(5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン-3-イルスルホニルメチル)-2-トリフルオロメチル-6,7-ジヒドロ-5H-ピラゾロ[5,1-b][1,3]オキサジン（本発明化合物番号 3-0019）の製造

3-(6,7-ジヒドロ-3-トリフルオロメチル-5H-ピラゾロ[5,1-b][1,3]オキサジン-4-イル-メチルチオ)-5,5-ジメチル-2-イソオキサ
20 ソリン 0.77 g (2.3 ミリモル) のクロロホルム溶液 20 ml に、氷冷下、m-クロロ過安息香酸 1.25 g (純度 70%, 5.1 ミリモル) を加え 1 時間攪拌した。その後、更に室温で 12 時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液、水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾
25 燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製

し、白色粉末（融点 151.0–152.0°C）の 3-(5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン-3-イルスルホニルメチル)-2-トリフルオロメチル-6,7-ジヒドロ-5H-ピラゾロ[5,1-b][1,3]オキサジン 0.36 g（収率 43%）を得た。

- 5 (¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.47 (2H, s), 4.40 (2H, t), 4.23 (2H, t), 3.09 (2H, s), 2.34 (2H, m), 1.50 (6H, s)

次に、一般式 [I] を有する本発明化合物の代表的な化合物例の物性例を表 11 ~ 表 20 に記載する。尚、化合物番号は上記実施例に記載したものに対応する。

表 1 1

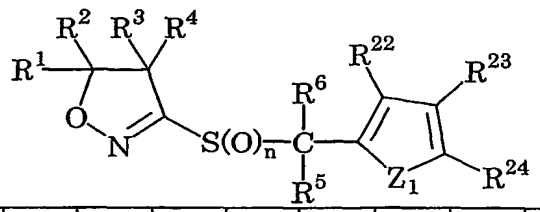
												
化合物 番 号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Z ₁	R ²²	R ²³	R ²⁴	融点(°C) 又は 屈折率 (n _D ²⁰)
1-0001	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	H	H	66-68
1-0002	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	Me	H	87-88
1-0003	Me	Me	H	H	2	H	H	S	H	H	Me	95-97
1-0004	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	H	H	70-72
1-0005	Me	Me	H	H	2	H	H	S	H	H	Cl	118-119
1-0006	Me	Me	H	H	2	H	H	O	H	H	H	測定不可
1-0007	Me	Me	H	H	2	H	H	O	H	H	C(=O)OMe	124-125

表 1 2

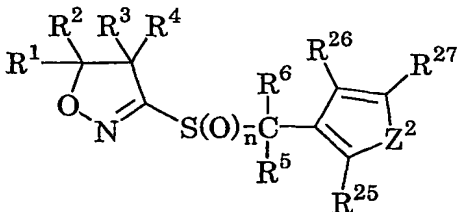
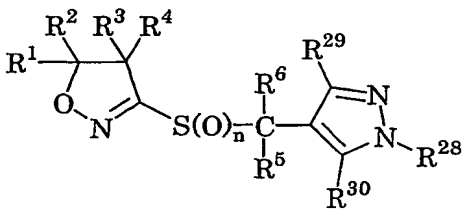
												
化合物 番 号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Z ²	R ²⁵	R ²⁶	R ²⁷	融点(°C) 又は 屈折率(n _D ²⁰)
2-0001	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=NOMe)Me	Me	95-96
2-0002	Me	Me	H	H	0	H	H	S	Me	C(=NOMe)Me	Me	
2-0003	Me	Me	H	H	2	H	H	S	H	H	H	99-101
2-0004	Me	Me	H	H	2	H	H	S	H	OMe	H	96-97
2-0005	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	H	Cl	125-127
2-0006	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	Cl	Cl	158-160
2-0007	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	Me	Me	117-117
2-0008	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Me	C(=O)Me	Me	146-148
2-0009	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Ph	C(=O)Me	Me	1.5730
2-0010	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Ph	C(=NOMe)Me	Me	129-131
2-0011	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	C(=O)OMe	Cl	157-158
2-0012	Me	Me	H	H	2	H	H	S	Cl	C(=O)NHMe	Cl	178-180
2-0013	Me	Me	H	H	2	H	H	O	H	H	H	58-61
2-0014	Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	H	Cl	180-181

表 1 3

											
化合物 番 号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	R ²⁹	R ²⁸	R ³⁰	融点(°C)又は 屈折率(n _D ²⁰)
3-0001	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	Cl	89-90
3-0002	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	Cl	132-133
3-0003	Me	Me	H	H	1	H	H	Ph	Me	Cl	測定不可
3-0004	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Et	158-160
3-0005	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	N(Me) ₂	150-151
3-0006	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Bu-t	Cl	79-81
3-0007	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	H	Cl	120-122
3-0008	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	41-42
3-0009	Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	89-90
3-0010	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	126-127
3-0011	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	136-137
3-0012	Me	Me	H	H	2	H	H	OEt	Me	CF ₃	124-125
3-0013	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OMe	113-114
3-0014	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(2-Cl)Ph	67-70
3-0015	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OPen-c	113-114
3-0016	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	CN	105-108
3-0017	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Et	Cl	105-107
3-0018	Me	Me	H	H	2	H	H	CHF ₂	Me	Cl	78-79
3-0019	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	-(CH ₂) ₃ O-		151-152
3-0020	Me	Me	H	H	0	H	H	CHF ₂	Me	Cl	1.5183
3-0021	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	F	
3-0022	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	SEt	
3-0023	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Ph	N(Me) ₂	
3-0024	Me	Me	H	H	0	H	H	OMe	Me	CF ₃	
3-0025	Me	Me	H	H	0	H	H	OH	Me	CF ₃	
3-0026	Me	Me	H	H	0	H	H	OEt	Me	CF ₃	
3-0027	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	F	
3-0028	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OMe	
3-0029	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	O(2-Cl)Ph	

3-0030	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	OPen-c	
3-0031	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Me	CN	
3-0032	Me	Me	H	H	0	H	H	Cl	Et	Cl	
3-0033	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	-(CH ₂) ₃ O-		
3-0034	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	H	Cl	138-140
3-0035	Me	Me	H	H	2	H	H	H	Me	Cl	105-106
3-0036	Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Me	Me	148-150
3-0037	Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Me	Cl	99-101
3-0038	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	Cl	143-145
3-0039	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	115-116
3-0040	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	CF ₃	120-122
3-0041	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	F	79-82
3-0042	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OH	90-92
3-0043	Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	Me	CF ₃	125-126
3-0044	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OEt	92-94
3-0045	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OPr-i	69-71
3-0046	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OPr	82-83
3-0047	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OBu-t	86-89
3-0048	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OBu	61-62
3-0049	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OHex-c	124-125
3-0050	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Pr-c	93-94
3-0051	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Pen-c	112-113
3-0052	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Hex-c	56-59
3-0053	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ C≡CH	92-93
3-0054	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	129-130
3-0055	Me	Me	H	H	2	H	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	測定不可
3-0056	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	89-91
3-0057	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	93-95
3-0058	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	1.4872
3-0059	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ Ph	79-81
3-0060	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OPh	122-123
3-0061	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-Cl)Ph	測定不可
3-0062	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(3-OMe)Ph	1.5059
3-0063	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(4-Cl)Ph	68-69
3-0064	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(4-Me)Ph	132-133
3-0065	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	O(4-OMe)Ph	115-117
3-0066	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	OC(=O)Me	130-131
3-0067	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	168-169

3-0068	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SEt	100-102
3-0069	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Et	107-108
3-0070	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Ph	166-168
3-0071	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Me	105-107
3-0072	Me	Me	H	H	2	H	H	Ph	Me	Cl	127-129
3-0073	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Et	Cl	111-112
3-0074	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Et	CF ₃	112-114
3-0075	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr-i	Cl	157-158
3-0076	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Pr-i	CF ₃	135-136
3-0077	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pr	Cl	89-90
3-0078	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Pr	CF ₃	111-113
3-0079	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-t	H	101-103
3-0080	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-t	Cl	118-119
3-0081	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-s	Cl	110-112
3-0082	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Bu-s	CF ₃	110-111
3-0083	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu-i	Cl	96-98
3-0084	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Bu-i	CF ₃	140-141
3-0085	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Bu	Cl	89-90
3-0086	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Bu	CF ₃	108-110
3-0087	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Ph	Cl	132-133
3-0088	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Ph	CF ₃	118-120
3-0089	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pen-c	Cl	130-131
3-0090	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Pen-c	CF ₃	147-148
3-0091	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Hex-c	Cl	151-152
3-0092	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pr-c	Cl	93-95
3-0093	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Pr-c	CF ₃	129-130
3-0094	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	1-cyclopropylethyl	Cl	87-89
3-0095	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	1-cyclopropylethyl	CF ₃	121-123
3-0096	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ (2-Methylcyclopropyl)	Cl	102-103
3-0097	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ (2-Methylcyclopropyl)	CF ₃	118-119
3-0098	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Bu-c	Cl	94-96
3-0099	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Bu-c	CF ₃	141-142
3-0100	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Pen-c	Cl	127-129
3-0101	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Pen-c	CF ₃	146-149
3-0102	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ Hex-c	Cl	152-154
3-0103	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ Hex-c	CF ₃	115-117
3-0104	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	78-80
3-0105	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	105-106

3-0106	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CH	Cl	73-74
3-0107	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C≡CH	CF ₃	108-109
3-0108	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CHMeC≡CH	Cl	95-96
3-0109	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CHMeC≡CH	CF ₃	116-118
3-0110	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C≡CMe	Cl	114-115
3-0111	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C≡CMe	CF ₃	115-116
3-0112	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	72-74
3-0113	Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	108-109
3-0114	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CHF ₂	Cl	99-100
3-0115	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CHF ₂	CF ₃	107-109
3-0116	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	135-136
3-0117	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	112-115
3-0118	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	87-89
3-0119	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	125-128
3-0120	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ OEt	Cl	97-98
3-0121	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ OEt	CF ₃	128-129
3-0122	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OH	Cl	79-81
3-0123	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OH	CF ₃	93-94
3-0124	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OMe	Cl	102-104
3-0125	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OMe	CF ₃	118-119
3-0126	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ OEt	Cl	56-59
3-0127	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ OEt	CF ₃	118-119
3-0128	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ SMe	Cl	103-105
3-0129	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ SMe	CF ₃	128-129
3-0130	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ SO ₂ Me	Cl	157-159
3-0131	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ SO ₂ Me	CF ₃	165-166
3-0132	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ SO ₂ Me	Cl	155-157
3-0133	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CH ₂ SO ₂ Me	CF ₃	166-168
3-0134	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	128-129
3-0135	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ CN	CF ₃	117-118
3-0136	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)OEt	Cl	127-129
3-0137	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)OEt	CF ₃	143-145
3-0138	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)NH ₂	Cl	173-174
3-0139	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)NH ₂	CF ₃	182-183
3-0140	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)N(Me) ₂	Cl	142-143
3-0141	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)N(Me) ₂	CF ₃	181-182
3-0142	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)Me	Cl	148-149
3-0143	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	CH ₂ C(=O)Me	CF ₃	163-164

3-0144	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	CH ₂ CH ₂ C(=O)Me	Cl	89-91
3-0145	Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Ph	Me	140-141
3-0146	Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Ph	Cl	124-125
3-0147	Me	Me	H	H	2	H	H	Et	Ph	Cl	112-113
3-0148	Me	Me	H	H	2	H	H	Pr	Ph	Cl	122-123
3-0149	Me	Me	H	H	2	H	H	Pr-i	Ph	Cl	116-117
3-0150	Me	Me	H	H	2	H	H	Bu-t	Ph	Cl	100-102
3-0151	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	H	111-112
3-0152	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	Me	129-132
3-0153	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	CF ₃	112-113
3-0154	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	F	90-91
3-0155	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OMe	104-106
3-0156	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OEt	129-131
3-0157	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OPr-i	86-88
3-0158	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OPr	117-118
3-0159	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OBu-t	105-108
3-0160	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	90-92
3-0161	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	SO ₂ Me	167-168
3-0162	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Ph	CN	113-115
3-0163	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(2-Cl)Ph	Cl	153-154
3-0164	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(3-Cl)Ph	Cl	106-107
3-0165	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-Cl)Ph	Cl	142-143
3-0166	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-F)Ph	Cl	135-138
3-0167	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-OMe)Ph	Cl	136-138
3-0168	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-Me)Ph	Cl	129-130
3-0169	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-NO ₂)Ph	Cl	145-147
3-0170	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-CN)Ph	Cl	91-93
3-0171	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-C(=O)Me)Ph	Cl	133-135
3-0172	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	(4-C(=O)OMe)Ph	Cl	121-124
3-0173	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	Pyrimidin-2-yl	Cl	148-150
3-0174	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	4,6-Dimethoxypyrimidin-2-yl	Cl	117-118
3-0175	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	SO ₂ Me	Cl	146-148
3-0176	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	SO ₂ Ph	Cl	145-148
3-0177	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)Me	Cl	130-131
3-0178	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)Ph	Cl	114-117
3-0179	Me	Me	H	H	2	H	H	CF ₃	C(=O)OMe	Cl	104-106
3-0180	Me	Et	H	H	2	H	H	CF ₃	Me	Cl	108-110

3-0181	Me	Me	H	H	0	H	H	CHF ₂	Me	Cl	1.5183
3-0182	Me	Me	H	H	0	H	H	Ph	Me	Cl	76-77
3-0183	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	Bu-t	OMe	1.4831
3-0184	Me	Me	H	H	0	H	H	CF ₃	CH ₂ C(=O)NH ₂	Cl	179-180
3-0185	Me	Me	H	H	0	H	H	Me	Ph	Cl	58-60

表 1 4

化合物 番号	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Z ³	R ³¹	R ³²	融点(°C) 又は 屈折率 (n _D ²⁰)
4-0001	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	Me	135-136
4-0002	Me	H	H	2	H	H	S	Me	Cl	113-114
4-0003	Me	H	H	0	H	H	O	CF ₃	Me	
4-0004	Me	H	H	0	H	H	S	Me	Cl	
4-0005	Me	H	H	2	H	H	O	Me	Me	178-179
4-0006	Me	H	H	2	H	H	O	CF ₃	OEt	89-91
4-0007	Me	H	H	2	H	H	O	Ph	Me	81-83
4-0008	Me	H	H	2	H	H	S	Me	OEt	109-111

222

表 1 5

化合物 番 号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Z ⁴	R ³³	R ³⁴	融点(°C)又は 屈折率(n _D ²⁰)
5-0001	Me	Me	H	H	2	H	H	Nme	Cl	Me	114-115
5-0002	Me	Me	H	H	2	H	H	Nme	Cl	Et	107-108
5-0003	Me	Me	H	H	2	H	H	Nme	CF ₃	H	142-143
5-0004	Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₄ -		123-125
5-0005	Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OEt	Me	1.5397
5-0006	Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OCHF ₂	Me	1.5339
5-0007	Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	CF ₃	H	99-101
5-0008	Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	OCH ₂ CH=CH ₂	Me	87-90
5-0009	Me	Me	H	H	1	H	H	NPh	OCH ₂ CH=CH ₂	Me	1.5702

表 1 6

化合物 番 号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Z ⁵	R ³⁵	R ³⁶	融点(°C)又は 屈折率(n _D ²⁰)
6-0001	Me	Me	H	H	2	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₄ -		測定不可
6-0002	Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	H	OEt	107-108
6-0003	Me	Me	H	H	2	H	H	NPh	H	OCHF ₂	1.5383
6-0004	Me	Me	H	H	2	H	H	O	Me	H	100-102
6-0005	Me	Me	H	H	0	H	H	NCHF ₂	-(CH ₂) ₄ -		1.5264

表 1 7

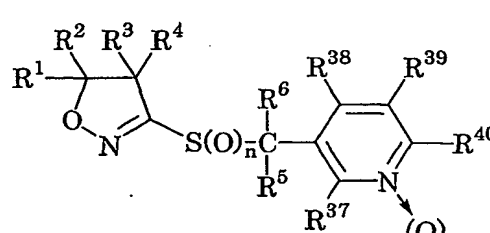
													
化合物 番 号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	R ³⁷	R ³⁸	R ³⁹	R ⁴⁰		融点(°C)又は 屈折率(n _D ²⁰)
7-0001	Me	Me	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	-	77-80
7-0002	Me	Me	H	H	2	H	H	H	CF ₃	H	H	N-oxide	114-116
7-0003	Me	Me	H	H	0	H	H	H	CF ₃	H	H	-	
7-0004	Me	Me	H	H	2	H	H	H	H	H	H	-	130-131
7-0005	Me	Me	H	H	2	H	H	H	H	H	H	N-oxide	166-168
7-0006	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Ph	H	H	-	118-120
7-0007	Me	Me	H	H	2	H	H	Ome	Ph	H	H	-	105-106
7-0008	Me	Me	H	H	2	H	H	Cl	Me	H	H	-	115-116
7-0009	Me	Me	H	H	2	H	H	Ome	Me	H	H	-	134-135
7-0010	Me	Me	H	H	2	H	H	Me	Me	H	H	N-oxide	198-199
7-0011	Me	Me	H	H	2	H	H	Ph	Ph	H	H	-	161-162
7-0012	Me	Me	H	H	1	H	H	H	H	H	H	-	97-99
7-0013	Me	Me	H	H	0	H	H	(2-Chloropyridin- 3-yl)methylthio	H	H	H	-	154-155

表 1 8

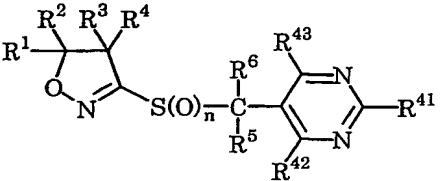
											
化合物 番号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	R ⁴¹	R ⁴²	R ⁴³	融点(°C)又は 屈折率(n _D ²⁰)
8-0001	Me	Me	H	H	2	H	H	H	OMe	CF ₃	175-176
8-0002	Me	Me	H	H	0	H	H	H	OMe	CF ₃	
8-0003	Me	Me	H	H	2	H	H	H	Cl	Cl	119-120
8-0004	Me	Me	H	H	2	H	H	H	OEt	CF ₃	94-95
8-0005	Me	Me	H	H	2	H	H	H	OMe	OMe	186-187
8-0006	Me	Me	H	H	2	H	H	Me	OMe	CF ₃	143-144
8-0007	Me	Me	H	H	2	H	H	OMe	OMe	CF ₃	144-145
8-0008	Me	Me	H	H	2	H	H	SMe	OMe	CF ₃	160-162
8-0009	Me	Me	H	H	2	H	H	SO ₂ Me	OMe	CF ₃	144-146
8-0010	Me	Me	H	H	2	H	H	NH ₂	OMe	CF ₃	208-209
8-0011	Me	Me	H	H	2	Pr-i	H	H	H	CF ₃	112-113
8-0012	Me	Me	H	H	0	Pr-i	H	H	H	CF ₃	1.4986

表 1 9

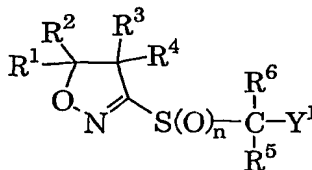
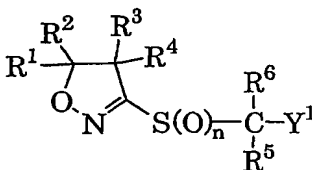
									
化合物 番 号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Y ¹	融点(°C)又は 屈折率(n _D ²⁰)
9-0001	Me	Me	H	H	2	H	H	Pyridin-2-yl	116-118
9-0002	Me	Me	H	H	2	H	H	Pyridin-2-yl 1-oxide	140-143
9-0003	Me	Me	H	H	2	H	H	Pyridin-4-yl	133-136
9-0004	Me	Me	H	H	2	H	H	Pyridin-4-yl 1-oxide	110-113
9-0005	Me	Me	H	H	2	H	H	1,2,4-Oxadiazol-3-yl	測定不可
9-0006	Me	Me	H	H	2	H	H	3-Phenyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl	153-154
9-0007	Me	Me	H	H	2	H	H	3-Benzyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl	108-109
9-0008	Me	Me	H	H	2	H	H	2-Chlorothiazol-4-yl	110-112
9-0009	Me	Me	H	H	2	H	H	1,4-Dimethylimidazol-5-yl	163-164
9-0010	Me	Me	H	H	1	H	H	Pyridin-2-yl	81-82
9-0011	Me	Me	H	H	1	H	H	Pyridin-4-yl	94-96
9-0012	Me	Me	H	H	1	H	H	1,4-Dimethylimidazol-5-yl	138-140
9-0013	Me	Me	H	H	0	H	H	1,4-Dimethylimidazol-5-yl	1.5427

表 2 0

									
化合物 番 号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n	R ⁵	R ⁶	Y ¹	融点(°C)又は 屈折率(n _D ²⁰)
10-0001	Me	Me	H	H	2	H	H	Benzimidazol-2-yl	171-174
10-0002	Me	Me	H	H	2	H	H	Benzothiophen-2-yl	181-183
10-0003	Me	Me	H	H	2	H	H	3-Chlorobenzothiophen-2-yl	109-112
10-0004	Me	Me	H	H	2	H	H	Benzotriazol-1-yl	206-207
10-0005	Me	Me	H	H	2	H	H	1-Methylindazol-4-yl	128-130
10-0006	Me	Me	H	H	2	H	H	Benzothiazol-2-yl	142-143
10-0007	Me	Me	H	H	2	H	H	Benzothiophen-3-yl	188-191
10-0008	Me	Me	H	H	2	H	H	5-Chlorobenzothiophen-3-yl	129-130
10-0009	Me	Me	H	H	2	H	H	Benzoxazol-2-yl	127-129
10-0010	Me	Me	H	H	2	H	H	3-Methylbenzothiophen-2-yl	161-163
10-0011	Me	Me	H	H	2	H	H	3-Bromobenzothiophen-2-yl	118-119
10-0012	Me	Me	H	H	2	H	H	Benzofuran-2-yl	123-124
10-0013	Me	Me	H	H	2	H	H	2-Methylbenzofuran-7-yl	135-137
10-0014	Me	Me	H	H	2	H	H	3-Bromobenzofuran-2-yl	107-108
10-0015	Me	Me	H	H	2	H	H	Benzothiophen-7-yl	95-97
10-0016	Me	Me	H	H	2	H	H	1-Methylindazol-7-yl	89-90
10-0017	Me	Me	H	H	2	H	H	3-Methylbenzofuran-2-yl	111-112
10-0018	Me	Me	H	H	2	H	H	3-Chloro-1-methylindol-2-yl	162-165

(中間体の製造例)

<参考例 1>

5 3-クロロ-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリンの製造

グリオキシル酸アルドオキシム 182.7 g (2.05モル) の 1,2-ジメトキシエタン 2 l 溶液に、65～70℃で N-クロロコハク酸イミド 534.0 g (4.0モル) を徐々に加えた後、1時間加熱還流した。氷冷下、炭酸水素カリウム 14

40.0 g (14.4モル) 及び水 10 ml を加えた後、2-メチルプロペン 360.0 g (6.4モル) を反応溶液に加え、室温で24時間攪拌した。反応溶液を水中に注ぎジイソプロピルエーテルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、黄色粘調性液体の3-クロロ-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 107.7 g (収率 40.0%) を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 2.93 (2H, s)、1.47 (6H, s)

<参考例 2>

3-クロロ-5-エチル-5-メチル-2-イソオキサゾリンの製造

- 10 グリオキシル酸アルドオキシム 20.6 g (231.7ミリモル) の1,2-ジメトキシエタン 500 ml 溶液に、60℃でN-クロロコハク酸イミド 61.9 g (463.4ミリモル) を徐々に加えた。加え終わった後、10分間加熱還流した。次に、氷冷下、2-メチル-1-ブテン 50 ml (463.4ミリモル)、炭酸水素カリウム 98.9 g (1622ミリモル) 及び水 10 ml を加え12時間攪拌した。
- 15 反応溶液を水中に注ぎn-ヘキサンで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、淡黄色粘調性液体の3-クロロ-5-エチル-5-メチル-2-イソオキサゾリン 13.9 g (収率 40.6%) を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 2.91 (2H, ABq, J=17.0, Δν=46.1Hz), 1.73 (2H, q)、

20 1.42 (3H, s)、0.96 (3H, t)

<参考例 3>

3-ベンジルチオ-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリンの製造

- ベンジルメルカプタン 2.8 g (22.5ミリモル) のN,N-ジメチルホルムアミド 50 ml 溶液に、窒素気流下、無水炭酸カリウム 3.2 g (23.2ミリモル) 及び3-クロロ-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 3.0 g (22.5ミリ
- 25

モル)を加え100℃で2時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸
 エチルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マ
 グネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグ
 ラフィーで精製し、黄色油状物質(屈折率 $n_D^{20}=1.5521$)の3-ベンジルチ
 5 オ-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリン3.1g(収率62.0%)を得た。
 ($^1\text{H-NMR}$ 値(CDCl_3/TMS δ (ppm)):7.24-7.39(5H, m)、4.26(2H, s)、2.77(2H, s)、
 1.40(6H, s)

<参考例4>

3-(2,6-ジフルオロベンジルスルフィニル)-5-エチル-5-メチル-
 10 2-イソオキサゾリンの製造

3-(2,6-ジフルオロベンジルチオ)-5-エチル-5-メチル-2-イ
 ソオキサゾリン4.1g(15.0ミリモル)のクロロホルム50ml溶液に、氷冷
 下、m-クロロ過安息香酸4.6g(純度70%、18.8ミリモル)を加え1時間
 攪拌した。その後、更に室温で12時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に
 15 注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭
 酸カリウム水溶液、水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥
 した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶
 媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、白色粉末(融点30℃以下)の3
 - (2,6-ジフルオロベンジルスルフィニル)-5-エチル-5-メチル-2-
 20 イソオキサゾリン1.5g(収率34.8%)を得た。

($^1\text{H-NMR}$ 値(CDCl_3/TMS δ (ppm)):7.39-7.28(1H, m)、7.03-6.94(2H, m)、4.38(2H, s)、
 3.04(1H, ABq, $J=17.2$, $\Delta\nu=85.7\text{Hz}$)+3.12(1H, s)、1.75(2H, m)、
 1.44(3H, s)+1.41(3H, s)、0.97(3H, m)

<参考例5>

25 3-(2,6-ジフルオロベンジルスルホニル)-5-エチル-5-メチル-2

ーイソオキサゾリンの製造

- 3- (2, 6-ジフルオロベンジルスルフィニル) -5-エチル-5-メチル-
2-イソオキサゾリン 0.8 g (2.8ミリモル) のクロロホルム 50 ml 溶液に、
氷冷下、m-クロロ過安息香酸 1.0 g (純度 70%、4.1ミリモル) を加え 1 時
5 間攪拌した。その後、更に室温で 12 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中
に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、
炭酸カリウム水溶液、水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾
燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開
溶媒: ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒) で精製し、白色粉末 (融点 64~65℃)
10 の 3- (2, 6-ジフルオロベンジルスルホニル) -5-エチル-5-メチル-2-
イソオキサゾリン 0.6 g (収率 75.0%) を得た。

(¹H-NMR値(CDCl₃/TMS δ (ppm)): 7.36-7.46 (1H, m)、6.98-7.04 (2H, m)、4.73 (2H, s)、
3.04 (2H, ABq, J=17.2, Δν=51.1Hz)、1.77 (2H, q)、1.46 (3H, s)、0.97 (3H, t)

<参考例 6>

- 15 5, 5-ジメチル-3-メチルスルホニル-2-イソオキサゾリンの製造

- 3-クロロ-5, 5-ジメチル-2-イソオキサゾリン 143.0 g (1.07モ
ル) のN, N-ジメチルホルムアミド 500 ml 溶液に、氷冷下、メチルメルカプ
タンナトリウム水溶液 1.0 kg (含量 15%、2.14モル) を滴下し、その後室
温で 12 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。
20 得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下
溶媒を留去し、5, 5-ジメチル-3-メチルチオール-2-イソオキサゾリンを 11
5.0 g (収率 74.1%) 得た。この残渣 (741.2ミリモル) をクロロホルム
1 l に溶解し、氷冷下、m-クロロ過安息香酸 392.0 g (純度 70%、1.59
モル) を加え 1 時間攪拌した。その後、更に室温で 12 時間攪拌した。反応終了後、
25 析出したm-クロロ安息香酸を濾別し、濾液を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、水、

炭酸水素ナトリウム水溶液及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をジイソプロピルエーテルで洗浄し、白色粉末（融点 82～84℃）の 5,5-ジメチル-3-メチルスルホニル-2-イソオキサゾリン 77.6 g（収率 59.1%）を得た。

- 5 ¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 3.26 (3H, s)、3.12 (2H, s)、1.51 (6H, s)

<参考例 7>

5,5-ジメチル-3-エチルチオ-2-イソオキサゾリンの製造

- 3-クロロ-5,5-ジメチル-2-イソオキサゾリンを含有した反応溶液に、エチルメルカプタン 560.0 g (9.0 モル) および水酸化ナトリウム 360.0 g (9.0 モル) の水溶液 1500 ml を加えた。その後、60～70℃で16時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、濃赤色油状の 5,5-ジメチル-3-エチルチオ-2-イソオキサゾリンの粗化合物 270.0 g 得た。
- 10

- 15 <参考例 8>

5,5-ジメチル-3-エチルスルホニル-2-イソオキサゾリンの製造

- 5,5-ジメチル-3-エチルチオ-2-イソオキサゾリンの粗油状物 270.0 g (1.7 モル) をクロロホルム 1.0 l に溶解し、氷冷下、m-クロロ過安息香酸 1050 g（純度 70%, 6.1 モル）を加え1時間攪拌し、その後、更に室温で12時間攪拌した。反応終了確認後、析出したm-クロロ安息香酸を濾別し、濾液を亜硫酸水素ナトリウム水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液、水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をn-ヘキサンで洗浄し、白色粉末の 5,5-ジメチル-3-エチルスルホニル-2-イソオキサゾリン 133.6 g（収率 65.4%）を得た。
- 20

- 25 <参考例 9>

1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-5-オール⁵の製造

トリフルオロアセト酢酸エチルエステル 34.1 g (184.9 ミリモル) のエタノール 500 ml 溶液にフェニルヒドラジン 20 g (184.9 ミリモル) 及び濃塩酸 4 ml を加えた後、1 時間加熱還流した。反応終了後、減圧下溶媒を大部分留去し、残渣に水を加えて結晶を析出させた。ろ過し、得られた結晶をろ液が中性になるまで水で洗浄した後、乾燥して、黄土色結晶の 1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-5-オール 37.1 g (収率 87.9%) を得た。

(¹H-NMR 値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 7.68-7.41 (5H, m), 5.86 (1H, s), 3.71 (1H, s)

10 <参考例 10>

5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒド⁵の製造

N,N-ジメチルホルムアミド 7.7 g (105.2 ミリモル) に、氷冷下、オキシ塩化リン 33.6 g (219.1 ミリモル) を加えた。次に、室温で 1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-5-オール 20 g (87.7 ミリモル) を加えた後、1 時間加熱還流した。反応終了後、氷冷下、反応溶液を水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を炭酸水素ナトリウム水溶液及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒: ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒) で精製し、白色結晶の 5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒド 19.1 g (収率 79.1%) を得た。

(¹H-NMR 値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 10.06 (1H, s), 7.57 (5H, s)

<参考例 11>

25 (5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタノールの製造

水素化リチウムアルミニウム 0.21 g (5.5 ミリモル) の THF 70 ml 溶液を -30°C に冷却し、5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒド 3 g (10.9 ミリモル) のテトラヒドロフラン 30 ml 溶液を徐々に加えた。更に 30°C で 30 分間攪拌した。反応終了後、酢酸エチルを加えて攪拌した後、水を加え、しばらく攪拌した。この反応混合物を減圧ろ過し、ろ液を酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、白色結晶の (5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタノール 3.0 g (収率 99.9%) を得た。

10 $(^1\text{H-NMR}$ 値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) : 7.54-7.51 (5H, m), 4.71 (2H, d), 1.79 (1H, b)

<参考例 12>

4-ブロモメチル-5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾールの製造

(5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタノール 3.0 g (10.9 ミリモル) のジエチルエーテル 60 ml 溶液を -10°C に冷却し、三臭化リン 1.0 g (3.8 ミリモル) を加え、更に室温で 1 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、白色結晶の 4-ブロモメチル-5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール 3.6 g (収率 95.8%) を得た。

20 $(^1\text{H-NMR}$ 値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) : 7.58-7.48 (5H, m), 4.48 (2H, s)

<参考例 13>

5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒドの製造

25 5-クロロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4

ーカルボアルデヒド 33.0 g (120.1 ミリモル) のジメチルスルホキシド 500 ml 溶液に、ふっ化カリウム 10.5 g (180.2 ミリモル) を加え、100℃で2時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒: ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒド 26.5 g (収率 85.0%) を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 9.96(1H, s), 7.68-7.51(5H, m)

10 <参考例 14>

(5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタノールの製造

水素化ホウ素ナトリウム 1.6 g (41.0 ミリモル) のメタノール 300 ml 溶液に、氷冷下、5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒド 26.5 g (102.5 ミリモル) のメタノール 200 ml 溶液を加え、0℃で30分間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、(5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタノール 28.5 g (収率 100%) を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 7.65-7.41(5H, m), 4.68(2H, d), 1.73(1H, t)

<参考例 15>

4-ブロモメチル-5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾールの製造

25 (5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-

4-イル)-メタノール 27.5 g (105.7ミリモル)のジエチルエーテル 300 ml 溶液を 0℃に冷却し、三臭化りん 10.0 g (37.0ミリモル)を加え、更に室温で 2 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎジエチルエーテルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。

- 5 減圧下溶媒を留去し、4-ブロモメチル-5-フルオロ-1-フェニル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール 30.3 g (収率 88.8%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 7.66-7.42 (5H, m), 4.44 (2H, s)

<参考例 16>

- 10 1-tert-ブチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-5-オール
の製造

- トリフルオロアセト酢酸エチルエステル 552.3 g (3.0モル)のエタノール 1500 ml 溶液にtert-ブチルヒドラジン塩酸塩 373.8 g (3.0モル)及び濃塩酸 50 ml を加えた後、2 日間加熱還流した。反応終了後、減圧下溶媒を大部分留去し、残渣を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣を n-ヘキサンで洗浄し、白色粉末の 1-tert-ブチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-5-オール 369.0 g (収率 59.1%)を得た。
- 15

<参考例 17>

- 20 1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール
-4-カルボアルデヒドの製造

- N,N-ジメチルホルムアミド 87.7 g (1.2モル)に、氷冷下、オキシ塩化リン 462.0 g (3.0モル)を加えた。次に、室温で 1-tert-ブチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-5-オール 208.2 g (1.0モル)を加えた後、10 時間加熱還流した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を水、5%水酸化ナトリウム水溶液及び水で順次洗浄した
- 25

後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、白色結晶の1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒド 131.5 g (収率21.7%)を得た。

5 (¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 9.97(1H, d), 1.76(9H, s)

＜参考例18＞

(1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタノールの製造

1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒド 39.9 g (156.9ミリモル)のメタノール 300 ml
10 溶液を0℃に冷却し、水素化ホウ素ナトリウム 6.5 g (172.6ミリモル)を徐々に加え、更に室温で3時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、(1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオ
15 ロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタノール 37.7 g (収率93.6%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.60(2H, d), 1.72(9H, s), 1.58(1H, t)

＜参考例19＞

4-プロモメチル-1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾールの製造
20 (1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタノール 9.2 g (35.7ミリモル)のジエチルエーテル 100 ml

1 溶液を-10℃に冷却し、三臭化リン 11.6 g (42.9ミリモル)を加え、更に室温で一夜攪拌した。反応終了後、反応溶液を氷水中に注ぎジエチルエーテルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。
25

減圧下溶媒を留去し、4-ブロモメチル-1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール10.0 g (収率87.3%)を得た。

<参考例20>

5 (1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタンチオール⁵の製造

水酸化ナトリウム水和物21.8 g (純度70%、272.2ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド300 ml 溶液に4-ブロモメチル-1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール43.5 g (136.1ミリモル)を加え、更に室温で一夜攪拌した。反応終了後、反応溶液を氷水中に注ぎ
10 ジエチルエーテルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、(1-tert-ブチル-5-クロロ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタンチオール32.3 g (収率87.0%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 3.65 (2H, d), 1.90 (1H, t), 1.70 (9H, s)

15 <参考例21>

1-tert-ブチル-5-メトキシ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾールの製造

1-tert-ブチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-5-オール18.8 g (90.3ミリモル)のN,N-ジメチルホルムアミド100 ml 溶液に、
20 室温で無水炭酸カリウム15.0 g (108.4ミリモル) 及びヨウ化メチル19.3 g (135.5ミリモル)を加え、更に15時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎジエチルエーテルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、1-tert-
25 5-メトキシ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール20.0 g (収率99.8%)を得た。

<参考例 2 2>

1-tert-ブチル-4-クロロメチル-5-メトキシ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾールの製造

1-tert-ブチル-5-メトキシ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール 20.0 g (90.1 ミリモル) の酢酸 90 ml 溶液に、パラホルムアルデヒド 5.4 g (ホルムアルデヒド換算 180.2 ミリモル) 及び濃塩酸 20 ml を加え 60℃ で 30 分間加熱攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎジイソプロピルエーテルで抽出した。得られた有機層を水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、1-tert-ブチル-4-クロロメチル-5-メトキシ-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール 21.7 g (収率 89.0%) を得た。

<参考例 2 3>

3-メトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾールの製造

3-ヒドロキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール 10.0 g (60.2 ミリモル) の N, N-ジメチルホルムアミド 50 ml 溶液に、室温で無水炭酸カリウム 10.0 g (72.3 ミリモル) 及びヨウ化メチル 12.8 g (90.3 ミリモル) を加え、更に 15 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎジエチルエーテルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、3-メトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール 9.8 g (収率 90.7%) を得た。

<参考例 2 4>

4-クロロメチル-3-メトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾールの製造

3-メトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール 1.0

- 0 g (5.6ミリモル)の酢酸25ml溶液に、パラホルムアルデヒド0.45g (ホルムアルデヒド換算15.0ミリモル)及び濃塩酸5mlを加え80℃で2時間加熱攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ炭酸カリウムを用いて中和した後、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し4-クロロメチル-3-メトキシ-1-メチル-5-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール0.83g (収率65.0%)を得た。

<参考例25>

- 10 5-フルオロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒドの製造

- 5-クロロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒド60.4g (282.7ミリモル)のジメチルスルホキシド700ml溶液に、ふっ化カリウム42.0g (711.9ミリモル)を加え、120~140℃で5時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、5-フルオロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-36.8g (収率66.0%)を得た。

- 20 <参考例26>

(5-フルオロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタノールの製造

- 水素化ホウ素ナトリウム3.9g (102.6ミリモル)のメタノール500mlに溶液、氷冷下、5-フルオロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒド36.8g (187.6ミリモル)のメタノール2

00 ml 溶液を加えた。0℃で30分間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を7に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、(5-フルオロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-イル)-メタノール35.

5 4 g (収率95.4%)を得た。

<参考例27>

4-ブロモメチル-5-フルオロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾールの製造

5-フルオロ-1-メチル-3-トリフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-
10 -メタノール35.4 g (178.7ミリモル)のジエチルエーテル500 ml 溶液を-30℃に冷却し、三臭化りん54.0 g (199.5ミリモル)を加えた。室温で12時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎジエチルエーテルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、4-ブロモメチル-5-フルオロ-1-メチル-3-
15 トリフルオロメチル-1H-ピラゾール31.4 g (収率80.8%)を得た。

<参考例28>

(エトキシカルボニル)マロンジアルデヒドの製造

水素化ナトリウム12.6 g (純度60%、525.0ミリモル)をジエチルエーテルで数回デカントした後、ジエチルエーテル500 ml 溶液とした。そして、窒素気流下、0~10℃で、ギ酸エチル194 g (2.6モル)および3,3-ジエトキシ-プロピオン酸エチルエステル50 g (262.0ミリモル)を加えた。その後、室温で15時間攪拌し、反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、ジエチルエーテルで洗浄した。得られた水層を塩酸でpH1とした後、ジクロロメタンで抽出した。更に、得られた有機層を食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧
25 下溶媒を留去し、濃赤色油状の(エトキシカルボニル)マロンジアルデヒドの粗化合

物 37.6 g (収率 100%) を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 9.09 (2H, s), 5.26 (1H, s), 4.27 (2H, q), 1.28 (3H, t)

<参考例 29>

5 1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステルの製造

(エトキシカルボニル)マロンジアルデヒド 27.6 g (192 ミリモル) のエタノール 150 ml 溶液に氷冷下、ヒドラジン 6.2 g (193 ミリモル) を加え、室温で 17 時間攪拌した。その後、減圧下エタノールを留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒: ジクロロメタン-酢酸エチル混合溶媒) で精製し、黄色結晶の 1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステル 19.4 g (72.4%) を得た

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 8.08 (2H, s), 5.30 (1H, s), 4.31 (2H, q), 1.36 (3H, t)

<参考例 30>

15 1-エチル-1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステルの製造

1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステル 1.5 g (10.7 ミリモル) の N, N-ジメチルホルムアミド 50 ml 溶液に無水炭酸カリウム 3.7 g (26.8 ミリモル), ヨウ化エチル 4.2 g (26.6 ミリモル) を加え、室温で 20 時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒: ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒) で精製し、黄色油状物の 1-エチル-1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステル 1.6 g (収率 88.9%) を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 7.90 (2H, s), 4.28 (2H, q), 4.18 (2H, q), 1.51 (3H, t), 1.35 (3H, t)

<参考例 3 1>

3, 5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステルの製造

1-エチル-1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステル 1.6 g (9.5
5 ミリモル), N-クロロコハク酸イミド 5.1 g (38.3 ミリモル) をガラス封管に入れ、160℃で6時間反応させた。反応終了後、室温まで冷却し、反応物を四塩化炭素およびクロロホルムで洗浄、減圧ろ過した。得られたろ液(有機層)を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶
10 媒)で精製し、黄色油状物の3, 5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステル 1.0 g (収率 44.2%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.36(2H, q), 4.21(2H, q), 1.44(3H, t), 1.38(3H, t)

<参考例 3 2>

15 (3, 5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール-4-イル)メタノールの製造

水素化リチウムアルミニウム 0.16 g (4.2 ミリモル) のテトラヒドロフラン 70 ml 溶液を-50℃に冷却し、3, 5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステル 1.0 g (4.2 ミリモル) のテトラヒドロフ
20 ラン 30 ml 溶液をゆっくり滴下し、更に-50℃で3時間攪拌した。反応終了確認後、酢酸エチルを加えて、しばらく攪拌した後、更に水を加え、しばらく攪拌した。減圧ろ過し、ろ液を酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、茶色油状物の
(3, 5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール-4-イル)メタノール 0.8
25 2 g (収率 100%)を得た。

(^1H -NMR値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) : 4.52 (2H, s), 4.16 (2H, q), 1.43 (3H, t)

<参考例 3 3>

4-ブロモメチル-3, 5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾールの製造
(3, 5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾール-4-イル)メタノールO.

- 5 82 g (4.2ミリモル)のジエチルエーテル50ml溶液を -30°C に冷却し、三
臭化リン1.3 g (4.8ミリモル)を加え、更に室温で12時間攪拌した。反応終了
確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および
食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、黄色油
状物の4-ブロモメチル-3, 5-ジクロロ-1-エチル-1H-ピラゾールO.

- 10 9 g (収率81.8%)を得た。

(^1H -NMR値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) : 4.33 (2H, s), 4.13 (2H, q), 1.43 (3H, t)

<参考例 3 4>

3-ジフルオロメチル-1-メチル-1H-ピラゾール-5-オールの製造

- ジフルオロアセト酢酸エチルエステル30.0 g (180.6ミリモル)のエタノ
15 ール200ml溶液にメチルヒドラジン8.3 g (180.6ミリモル)及び濃塩酸
5mlを加えた後、2日間加熱還流した。反応終了後、減圧下溶媒を大部分留去し
た。残渣を水中に注ぎクエン酸でpH4とした後、酢酸エチルで抽出した。得られ
た有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減
圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキ
20 サン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、3-ジフルオロメチル-1-メチル-1H
-ピラゾール-5-オール8.9 g (収率33.3%)を得た。

<参考例 3 5>

5-クロロ-3-ジフルオロメチル-1-メチル-1H-ピラゾール-4-カ
ルボアルデヒドの製造

- 25 N, N-ジメチルホルムアミド7.9 g (108.0ミリモル)に、氷冷下、オキシ

塩化リン4 1.6 g (270.1ミリモル)を加えた。次に、室温で3-ジフルオロメチルー1-メチルー1H-ピラゾール-5-オール8.0 g (54.0ミリモル)を加えた後、4時間加熱還流した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を水、5%水酸化ナトリウム水溶液及び水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、白色結晶の5-クロロ-3-ジフルオロメチルー1-メチルー1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒド7.7 g (収率73.3%)を得た。¹H-NMR値(CDC1₃/TMS δ(ppm)):9.96(1H, s), 6.90(1H, t, J=53.6Hz), 3.93(3H, s)

10 <参考例36>

(5-クロロ-3-ジフルオロメチルー1-メチルー1H-ピラゾール-4-イル)-メタノールの製造

5-クロロ-3-ジフルオロメチルー1-メチルー1H-ピラゾール-4-カルボアルデヒド7.2 g (37.0ミリモル)のメタノール100ml溶液を0℃に冷却し、水素化ホウ素ナトリウム2.1 g (55.5ミリモル)を徐々に加え、更に室温で3時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、(5-クロロ-3-ジフルオロメチルー1-メチルー1H-ピラゾール-4-イル)-メタノール3.8 g (収率52.1%)を得た。

20 (¹H-NMR値(CDC1₃/TMS δ(ppm)):6.70(1H, t, J=40.8Hz), 4.63(2H, s), 3.86(3H, s), 1.79(1H, br)

<参考例37>

4-ブロモメチルー5-クロロ-3-ジフルオロメチルー1-メチルー1H-ピラゾールの製造

25 (5-クロロ-3-ジフルオロメチルー1-メチルー1H-ピラゾール-4-イ

ル)ーメタノール 2.0 g (10.0 ミリモル) のジエチルエーテル 50 ml 溶液をー
10℃に冷却し、三臭化リン 1.0 g (3.5 ミリモル) を加え、更に室温で一夜攪拌
した。反応終了後、反応溶液を氷水中に注ぎジエチルエーテルで抽出した。得られ
た有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を
5 留去し、4-ブロモメチルー5-クロロ-3-ジフルオロメチルー1-メチルー1
H-ピラゾール 2.6 g (収率 100.0%) を得た。

<参考例 38>

トリフルオロアセトアルデヒドオキシムエーテレート の製造

トリフルオロアセトアルデヒドヘミエチルアセタール 50.0 g (347.0 ミリ
10 モル) のメタノール 80 ml 溶液に、ヒドロキシルアミン塩酸塩 24.1 g (34
7.0 ミリモル)、水 160 ml を加え、氷冷下、50%水酸化ナトリウム水溶液
80.0 g (1.7 モル) を滴下した。滴下終了後室温で6時間攪拌した。反応終了
後、10%塩酸を加えて pH 6 とし、ジエチルエーテルで抽出した。減圧下溶媒を
留去し、残渣を蒸留し、トリフルオロアセトアルデヒドオキシムエーテレート 24.
15 7 g (収率 38.0%) を得た。

<参考例 39>

トリフルオロアセトヒドロキシモイルブロミドエーテレート の製造

トリフルオロアセトアルデヒドオキシムエーテレート 24.7 g (131.7 ミリ
20 モル) の N,N-ジメチルホルムアミド 50 ml 溶液に、氷冷下、N-ブロモこは
く酸イミド 38.8 g (218.0 ミリモル) の N,N-ジメチルホルムアミド 12
5 ml 溶液を加え、室温で3時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎジ
エチルエーテルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグ
ネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣を蒸留し、褐色油状物質のトリフ
ルオロアセトヒドロキシモイルブロミドエーテレート 33.3 g (収率 95.0%)
25 を得た。

(^1H -NMR値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) : 9.30 (1H, s)

<参考例 40>

4-エトキシカルボニル-5-メチル-3-トリフルオロメチルイソキサゾールの製造

- 5 アセト酢酸エチル 6.7 g (51.3ミリモル) のメタノール 80 ml 溶液に、ナトリウムメトキシド 2.8 g (51.3ミリモル) を加え、氷冷下、トリフルオロアセトヒドロキシモイルブロミドエーテレート 5.0 g (18.8ミリモル) のメタノール 20 ml 溶液を加えた。室温で3時間攪拌した。反応終了後、減圧下溶媒を留去し、水を加え、クロロホルムで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、
- 10 無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサノ-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、無色油状物質の4-エトキシカルボニル-5-メチル-3-トリフルオロメチルイソキサゾール 2.9 g (収率 69.0%) を得た。

(^1H -NMR値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) : 4.36 (2H, q), 2.77 (3H, s), 1.37 (3H, t)

15 <参考例 41>

(5-メチル-3-トリフルオロメチルイソキサゾール-4-イル)-メタノールの製造

- 水素化リチウムアルミニウム 0.16 g (4.2ミリモル) の THF 15 ml 溶液を 0°C に冷却し、4-エトキシカルボニル-5-メチル-3-トリフルオロメチルイソキサゾール 0.93 g (4.2ミリモル) の THF 15 ml 溶液を徐々に加えた。
- 20 0°C で1時間攪拌した。反応終了後、酢酸エチルを加えてしばらく攪拌した後、水を加え、しばらく攪拌した。減圧ろ過し、ろ液をジエチルエーテルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、(5-メチル-3-トリフルオロメチルイソキサゾール-4-イル)-
- 25 -メタノール 0.5 g (収率 60.0%) を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.60 (2H, d), 2.54 (3H, s), 1.66 (1H, br)

<参考例 4 2>

4-ブロモメチルー5-メチルー3-トリフルオロメチルイソキサゾールの製造

- 5 (5-メチルー3-トリフルオロメチルイソキサゾール-4-イル)-メタノール 0.45 g (2.5 ミリモル) のジエチルエーテル 10 ml 溶液を 0℃ に冷却し、三臭化りん 0.2 g (8.9 ミリモル) を加えた。室温で 1 時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎジエチルエーテルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、4-ブロモメ
- 10 チルー5-メチルー3-トリフルオロメチルイソキサゾール 0.5 g (収率 74.0%) を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.31 (2H, d), 2.51 (3H, s)

<参考例 4 3>

(5-クロロ-3-メチルーイソチアゾール-4-イル)-メタノールの製造

- 15 水素化リチウムアルミニウム 0.42 g (11.0 ミリモル) の THF 10 ml 溶液に、-30℃ で 5-クロロ-3-メチルーイソチアゾール-4-カルボン酸エチルエステル 2.06 g (10.0 ミリモル) の THF 10 ml 溶液を滴下し、更に同温度で 1 時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液に酢酸エチルを加えた後、水中にあげ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、
- 20 無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、(5-クロロ-3-メチルーイソチアゾール-4-イル)-メタノール 1.50 g (収率 91.5%) を得た。

<参考例 4 4>

4-クロロメチルー5-クロロ-3-メチルイソチアゾールの製造

- 25 (5-クロロ-3-メチルーイソチアゾール-4-イル)-メタノール 1.50 g

(9.15ミリモル)のクロロホルム10ml溶液に、室温で塩化チオニル3.26g (27.44ミリモル)を加え3時間攪拌した。反応終了確認後、減圧下溶媒を留去し、4-クロロメチルー5-クロロ-3-メチルイソチアゾール1.67g (収率定量的)を得た。

5 <参考例45>

4-トリフルオロメチルニコチン酸メチルエステルの製造

4-トリフルオロメチルニコチン酸 4.6g (24.1ミリモル)のN, N-ジメチルホルムアミド70ml溶液に、無水炭酸カリウム6.7g (48.6ミリモル), ヨウ化メチル6.9g (48.6ミリモル)を加え、室温で12時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、黄色油状物の4-トリフルオロメチルニコチン酸メチルエステル2.77g (収率56.1%)を得た。

15 (¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 9.11(1H, s), 8.92(1H, d), 7.64(1H, d), 3.99(3H, s)

<参考例46>

(4-トリフルオロメチルピリジン-3-イル)-メタノールの製造

水素化リチウムアルミニウム0.37g (9.7ミリモル)のTHF100ml溶液を-50℃に冷却し、4-トリフルオロメチルニコチン酸メチルエステル2.0g (9.8ミリモル)のTHF30ml溶液をゆっくり滴下し、更に-50℃で3時間攪拌した。反応終了確認後、酢酸エチルを加えて、しばらく攪拌した後、更に水を加え、再度しばらく攪拌した。反応混合物を減圧ろ過し、ろ液を酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶

媒：ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、黄色油状物の(4-トリフルオロメチルピリジン-3-イル)メタノール0.6 g (収率35.3%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 9.00 (1H, s), 8.73 (1H, d), 7.51 (1H, d), 4.95 (2H, s)

5 <参考例47>

3-ブロモメチル-4-トリフルオロメチルピリジンの製造

(4-トリフルオロメチルピリジン-3-イル)メタノール0.6 g (3.4ミリモル)のジエチルエーテル50 ml 溶液を-30℃に冷却し、三臭化リン1.4 g (5.2ミリモル)を加え、更に室温で12時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶
10 液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、黄色油状物の3-ブロモメチル-4-トリフルオロメチルピリジン0.61 g (収率75.3%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 8.88 (1H, s), 8.73 (1H, d), 7.54 (1H, d), 4.63 (2H, s)

15 <参考例48>

5-ブロモ-4-ヒドロキシ-6-トリフルオロメチルピリミジンの製造

4-ヒドロキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン49.2 g (300.0ミリモル)の酢酸600 ml 溶液に、室温で無水酢酸ナトリウム77.5 g (945.0ミリモル)を加えた。更に45℃で反応溶液中に臭素50.3 g (315ミリモル)を
20 徐々に加え、同温度で3時間攪拌した。反応終了確認後、減圧下溶媒を留去した。残渣を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をn-ヘキサンで洗浄し5-ブロモ-4-ヒドロキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン38.9 g (収率53.4%)を得た。

25 <参考例49>

5-ブロモ-4-クロロ-6-トリフルオロメチルピリミジンの製造

- 5-ブロモ-4-ヒドロキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン 24.3 g (100.0ミリモル)をオキシ塩化リン 18.5 g (120.0ミリモル)に懸濁させ、100℃で2時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を徐々に水にあげクロロホルムで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、5-ブロモ-4-クロロ-6-トリフルオロメチルピリミジン 21.5 g (収率82.4%)を得た。

<参考例50>

10 5-ブロモ-4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジンの製造

- 5-ブロモ-4-クロロ-6-トリフルオロメチルピリミジン 21.5 g (82.2ミリモル)のメタノール 100 ml 溶液に、室温でナトリウムメトキシド 16.7 ml (28%メタノール溶液 86.4ミリモル)を加え攪拌した。反応終了確認後、減圧下溶媒を留去した。残渣を水にあげ、クロロホルムで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をn-ヘキサンで洗浄し、5-ブロモ-4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン 19.2 g (収率91.0%)を得た。

<参考例51>

5-ブロモ-4-エトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジンの製造

- 20 5-ブロモ-4-クロロ-6-トリフルオロメチルピリミジン 3.00 g (11.48ミリモル)のエタノール 50 ml 溶液に、室温でナトリウムエトキシド 0.94 g (13.77ミリモル)を加え攪拌した。反応終了確認後、減圧下溶媒を留去した。残渣を水にあげ、クロロホルムで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し5-ブロモ-4-エトキシ-6-トリ
- 25

フルオロメチルピリミジン 2.44 g (収率 82.9%) を得た。

<参考例 52>

4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-カルボアルデヒドの製造

- 5 5-ブロモ-4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン 10.3 g (40.0 ミリモル) のテトラヒドロフラン 100 ml 溶液に、 $-65 \sim -60^{\circ}\text{C}$ で *n*-ブチルリチウム 30.0 ml (1.6 mol/l *n*-ヘキサン溶液 48.0 ミリモル) を徐々に加えた後、30 分間攪拌した。更に同温度で、ギ酸エチル 3.6 g (48.0 ミリモル) を加えた後、同温度で 3 時間攪拌した。反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-カルボアルデヒド 1.3 g (収率 15.8%) を得た。

($^1\text{H-NMR}$ 値 (CDCl_3/TMS δ (ppm)) : 10.41 (1H, q), 8.98 (1H, s), 4.18 (3H, s)

15 <参考例 53>

4-エトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-カルボアルデヒドの製造

- 5-ブロモ-4-エトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン 5.76 g (21.3 ミリモル) の THF 250 ml 溶液を -78°C に冷却し、*n*-ブチルリチウム 22.6 ml (1.6 mol/l *n*-ヘキサン溶液 36.1 ミリモル) を滴下し、40 分間攪拌した。ギ酸メチル 2.7 g (45.1 ミリモル) を加え、更に 1.5 時間攪拌した。反応終了後、塩化アンモニウム水溶液を加え、ジエチルエーテルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒 : *n*-ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒) で精製し、4-エトキシ-6-トリフルオロメチル
- 25

ピリミジンを5-カルボアルデヒド3.82 g (収率81.6%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 10.41 (1H, s), 8.95 (1H, s), 4.63 (2H, q), 1.48 (3H, t)

<参考例54>

5 (4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-イル)-メタノールの製造

4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-カルボアルデヒド1.3 g (6.3ミリモル)のメタノール30 ml 溶液に、室温で水素化ホウ素ナトリウム0.24 g (6.3ミリモル)を徐々に加え3時間攪拌した。反応終了確認後、水中
10 に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、(4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-イル)-メタノール0.42 g (収率32.1%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 8.93 (1H, s), 4.81 (2H, s), 4.13 (3H, s),
15 2.26 (1H, br)

<参考例55>

(4-エトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-イル)-メタノールの製造

水素化ホウ素ナトリウム1.7 g (45.7ミリモル)のメタノール50 ml 溶液
20 に、氷冷下、4-エトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-カルボアルデヒド3.82 g (17.2ミリモル)のメタノール50 ml 溶液を加え、更に0℃で1時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、(4-エトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-イル)-
25 メタノール3.77 g (収率97.8%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 8.80 (1H, s), 4.81 (2H, s), 4.59 (2H, q), 2.28 (1H, b), 1.48 (3H, t)

<参考例 5 6>

5 5-クロロメチル-4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジンの製造
(4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-イル)-メタノール
0.42 g (2.02ミリモル)のクロロホルム 10 ml 溶液に、室温で塩化チオニル
1.19 g (10.1ミリモル)を加え3時間攪拌した。反応終了確認後、減圧下溶媒
を留去し、5-クロロメチル-4-メトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン
0.45 g (収率：定量的)を得た。

10 <参考例 5 7>

5-ブロモメチル-4-エトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジンの製造
(4-エトキシ-6-トリフルオロメチルピリミジン-5-イル)-メタノール
3.77 g (17.0ミリモル)のジエチルエーテル 50 ml 溶液を 0℃に冷却し、三
臭化りん 2.0 g (7.2ミリモル)を加えた。室温で1時間攪拌した。生じた塩をメ
15 タノールで溶解し、更に1時間攪拌した。反応溶液を水中に注ぎジエチルエーテル
で抽出した。得られた有機層を食塩水で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥
した。減圧下溶媒を留去し、5-ブロモメチル-4-エトキシ-6-トリフルオロ
メチルピリミジンの粗化合物を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 8.79 (1H, s), 4.61 (2H, q), 4.55 (2H, s),
20 1.49 (3H, t)

<参考例 5 8>

(2-クロロ-4-メチルピリジン-3-イル)メタノールの製造
水素化リチウムアルミニウム 0.4 g (10.0ミリモル)のテトラヒドロフラン
30 ml 懸濁液に、-65~-60℃でメチル 2-クロロ-4-メチルニコチン
25 酸 1.9 g (10.0ミリモル)の THF 5.0 ml 溶液を徐々に加えた後、30分間

攪拌した。更に20℃で、1時間攪拌した。反応溶液を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、(2-クロロ-4-メチルピリジン-3-イル)メタノール0.6g (収率
5 38.2%)を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 8.19(1H, d), 7.08(1H, d), 4.85(2H, s), 2.49(3H, s)

<参考例59>

3-アセチル-4-クロロメチル-2,5-ジクロロチオフェンの製造

- 10 3-アセチル-2,5-ジクロロチオフェン5.0g(32.4ミリモル)のクロロメチルメチルエーテル26ml(323.0ミリモル)溶液に、氷冷下10℃での四塩化チタン(2mol/1ジクロロメタン溶液)33ml(66.0ミリモル)を滴下した。その後室温で2時間攪拌した。反応終了後、反応溶液を氷水中に注ぎクロロホルムで抽出した。得られた有機層を重曹及び水、食塩水で順次洗浄した後、無水
15 硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒:ヘキサン/酢酸エチル=9/1)で精製し、黄色結晶の3-アセチル-4-クロロメチル-2,5-ジクロロチオフェン2.6g(収率39.7%)を得た。

- (¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 4.70 (2H, s), 2.56 (3H, s), 2.54 (3H, s)
20 2.39(3H, s)

<参考例60>

3-ブロモ-2-ブロモメチルベンゾフランの製造

- 3-ブロモ-2-メチルベンゾフラン2.8g(13.3ミリモル)のモノクロロベンゼン30ml溶液に、N-ブロモコハク酸イミド2.7g(15.3ミリモル)及び
25 びアゾビスイソブチロニトリル0.4g(2.7ミリモル)を加えた後、80℃で30

分間攪拌した。原料消失を確認した後、反応溶液を室温にまで冷却した。不溶物を濾別し、濾液を減圧下溶媒を留去した。残渣を水中に注ぎ酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水及び食塩水で順次洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、3-ブロモ-2-ブロモメチルベンゾフラン 3.0 g (収率 79.0%) を得た。

<参考例 61>

1-ジフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステルの製造

1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステル 3.0 g (21.4 ミリモル) の N,N-ジメチルホルムアミド 100 ml 溶液に、無水炭酸カリウム 6.0 g (43.5 ミリモル) を加え、クロロジフルオロメタンを反応溶液に吹き込み、130~140℃で3時間攪拌した。反応終了確認後、反応溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を水および食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下溶媒を留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒: ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒)で精製し、無色透明油状物の 1-ジフルオロメチル-1H-ピラゾール-4-カルボン酸エチルエステル 1.67 g (収率 41.0%) を得た。

(¹H-NMR値 (CDCl₃/TMS δ (ppm)) : 8.32(1H, s), 8.04(1H, s), 7.20(1H, t), 4.32(2H, q), 1.37(3H, t)

20 本発明の除草剤は、一般式 [I] で示されるイソオキサゾリン誘導体及これを有効成分としてなる。

本発明化合物を除草剤として使用するには本発明化合物それ自体で用いてもよいが、製剤化に一般的に用いられる担体、界面活性剤、分散剤又は補助剤等を配合して、粉剤、水和剤、乳剤、フロアブル剤、微粒剤又は粒剤等に製剤して使用することもできる。

製剤化に際して用いられる担体としては、例えばタルク、ベントナイト、クレイ、カオリン、珪藻土、ホワイトカーボン、パーミキュライト、炭酸カルシウム、消石灰、珪砂、硫酸、尿素等の固体担体、イソプロピルアルコール、キシレン、シクロヘキサン、メチルナフタレン等の液体担体等があげられる。

- 5 界面活性剤及び分散剤としては、例えばアルキルベンゼンスルホン酸金属塩、ジナフチルメタンジスルホン酸金属塩、アルコール硫酸エステル塩、アルキルアリースルホン酸塩、リグニンスルホン酸塩、ポリオキシエチレングリコールエーテル、ポリオキシエチレンアルキルアリアルエーテル、ポリオキシエチレンソルビタンモノアルキレート等があげられる。補助剤としては、例えばカルボキシメチルセルロース、
10 ポリエチレングリコール、アラビアゴム等があげられる。使用に際しては適当な濃度に希釈して散布するか又は直接施用する。

本発明の除草剤は茎葉散布、土壌施用又は水面施用等により使用することができる。有効成分の配合割合については必要に応じて適宜選ばれるが、粉剤又は粒剤とする場合は0.01～10%（重量）、好ましくは0.05～5%（重量）の範囲
15 から適宜選ぶのがよい。乳剤及び水和剤とする場合は1～50%（重量）、好ましくは5～30%（重量）の範囲から適宜選ぶのがよい。又、フロアブル剤とする場合は1～40%（重量）、好ましくは5～30%（重量）の範囲から適宜選ぶのがよい。

本発明の除草剤の施用量は使用される化合物の種類、対象雑草、発生傾向、環境
20 条件ならびに使用する剤型等によってかわるが、粉剤及び粒剤のようにそのまま使用する場合は、有効成分として1ヘクタール当たり1g～50kg、好ましくは10g～10kgの範囲から適宜選ぶのがよい。又、乳剤、水和剤及びフロアブル剤とする場合のように液状で使用する場合は、0.1～50,000ppm、好ましくは10～10,000ppmの範囲から適宜選ぶのがよい。

25 又、本発明の化合物は必要に応じて殺虫剤、殺菌剤、他の除草剤、植物生長調節

剤、肥料等と混用してもよい。

次に代表的な製剤例をあげて製剤方法を具体的に説明する。化合物、添加剤の種類及び配合比率は、これのみに限定されることなく広い範囲で変更可能である。以下の説明において「部」は重量部を意味する。

5 〈製剤例 1〉 水和剤

化合物（3-0006）の10部にポリオキシエチレンオクチルフェニルエーテルの0.5部、 β -ナフタレンスルホン酸ホルマリン縮合物ナトリウム塩の0.5部、珪藻土の20部、クレーの69部を混合粉碎し、水和剤を得た。

 〈製剤例 2〉 フロアブル剤

- 10 粗粉碎した化合物（3-0006）20部を水69部に分散させ、ポリオキシエチレンスチレン化フェニルエーテル硫酸塩4部、エチレングリコール7部を加えるとともにシリコーンAF-118N（旭化成工業株式会社製）を製剤に対し200ppm加え、高速攪拌機にて30分間混合した後、湿式粉碎機にて粉碎しフロアブル剤を得た。

15 〈製剤例 3〉 乳剤

化合物（3-0006）の30部にキシレンとイソホロンの等量混合物60部、界面活性剤ポリオキシエチレンソルビタンアルキレート、ポリオキシエチレンアルキルアリールポリマー及びアルキルアリールスルホネートの混合物の10部を加え、これらをよくかきまぜることによって乳剤を得た。

20 〈製剤例 4〉 粒剤

- 化合物（3-0006）の10部、タルクとベントナイトを1：3の割合で混合した増量剤の80部、ホワイトカーボンの5部、界面活性剤ポリオキシエチレンソルビタンアルキレート、ポリオキシエチレンアルキルアリールポリマー及びアルキルアリールスルホネートの混合物の5部に水10部を加え、よく練ってペースト状
25 としたものを直径0.7mmのふるい穴から押し出して乾燥した後に0.5～1mm

mの長さに切断し、粒剤を得た。

次に試験例をあげて本発明化合物の奏する効果を説明する。

〈試験例 1〉 水田土壌処理による除草効果試験

- 100 cm²プラスチックポットに水田土壌を充填し、代掻後、タイヌビエ、コナギの種子を播種し、水深 3 cm に湛水した。翌日、製剤例 1 に準じて調製した水和剤を水で希釈し、水面滴下した。施用量は、有効成分を、1 ヘクタール当り 1 0 0 0 g とした。その後、温室内で育成し、処理後 2 1 日目に表 2 1 の基準に従って除草効果を調査した。結果を表 2 2 に示す。

10

表 2 1

指数	指数 除草効果(生育抑制程度)及び薬害
5	90%以上の抑制の除草効果、薬害
4	70%以上90%未満の除草効果、薬害
3	50%以上70%未満の除草効果、薬害
2	30%以上50%未満の除草効果、薬害
1	10%以上30%未満の除草効果、薬害
0	0%以上10%未満の除草効果、薬害

表 2 2

化合物番号	薬量(g a.i. /ha)	タイヌビエ	コナギ
1-0001	1000	5	5
1-0002	1000	5	5
1-0003	1000	5	5
1-0004	1000	5	5
1-0005	1000	5	5
2-0001	1000	5	5
2-0003	1000	5	5
2-0004	1000	5	5
2-0005	1000	5	5
2-0006	1000	5	5
2-0008	1000	5	5

2-0011	1000	5	5
2-0012	1000	5	5
3-0002	1000	5	5
3-0004	1000	5	5
3-0009	1000	5	5
3-0013	1000	5	5
3-0014	1000	5	5
3-0015	1000	5	5
3-0016	1000	5	5
3-0034	1000	5	5
3-0035	1000	5	5
3-0037	1000	5	5
3-0038	1000	5	5
3-0039	1000	5	5
3-0040	1000	5	5
3-0041	1000	5	5
3-0044	1000	5	5
3-0047	1000	5	5
3-0049	1000	5	5
3-0051	1000	5	5
3-0054	1000	5	5
3-0059	1000	5	5
3-0060	1000	5	5
3-0061	1000	5	5
3-0070	1000	5	5
3-0072	1000	5	5
3-0073	1000	5	5
3-0074	1000	5	5
3-0081	1000	5	5
3-0082	1000	5	5
3-0083	1000	5	5
3-0084	1000	5	5
3-0085	1000	5	5
3-0086	1000	5	5
3-0087	1000	5	5
3-0088	1000	5	5
3-0089	1000	5	5
3-0090	1000	5	5
3-0091	1000	5	5

3-0100	1000	5	5
3-0101	1000	5	5
3-0102	1000	5	5
3-0103	1000	5	5
3-0114	1000	5	5
3-0115	1000	5	5
3-0117	1000	5	5
3-0118	1000	5	5
3-0119	1000	5	5
3-0120	1000	5	5
3-0121	1000	5	5
3-0124	1000	5	5
3-0125	1000	5	5
3-0126	1000	5	5
3-0127	1000	5	5
3-0128	1000	5	5
3-0129	1000	5	5
3-0130	1000	5	5
3-0131	1000	5	5
3-0134	1000	5	5
3-0135	1000	5	5
3-0137	1000	5	5
3-0139	1000	5	5
3-0144	1000	5	5
3-0153	1000	5	5
3-0156	1000	5	5
3-0160	1000	5	5
3-0173	1000	5	5
3-0174	1000	5	5
3-0176	1000	5	5
3-0177	1000	5	5
3-0178	1000	5	5
3-0180	1000	5	5
4-0001	1000	5	5
4-0002	1000	5	5
4-0005	1000	5	5
4-0007	1000	5	5
4-0008	1000	5	5
5-0001	1000	5	5

5-0002	1000	5	5
5-0003	1000	5	5
5-0005	1000	5	5
5-0006	1000	5	5
5-0007	1000	5	5
6-0003	1000	5	5
6-0004	1000	5	5
7-0004	1000	5	5
7-0006	1000	5	5
7-0008	1000	5	5
7-0009	1000	5	5
8-0001	1000	5	5
8-0012	1000	5	5
9-0001	1000	5	5
9-0003	1000	5	5
9-0005	1000	5	5
9-0006	1000	5	5
9-0008	1000	5	5
10-0002	1000	5	4
10-0003	1000	5	5
10-0004	1000	5	5
10-0005	1000	5	5
10-0006	1000	5	5
10-0008	1000	5	5
10-0009	1000	5	5
10-0011	1000	5	5
10-0012	1000	5	5
10-0013	1000	5	5
10-0014	1000	5	5
10-0015	1000	5	5
10-0016	1000	5	5
10-0017	1000	5	5
10-0018	1000	5	5

〈試験例2〉 畑地土壌処理による除草効果試験

80cm²プラスチックポットに畑土壌を充填し、イヌビエ、エノコログサの種子を播種して覆土した。製剤例1に準じて調製した水和剤を水で希釈し、1ヘクタ

ール当り有効成分が1000gになる様に、1ヘクタール当り1000lを小型噴霧器で土壌表面に均一に散布した。その後、温室内で育成し、処理21日目に表21の基準に従って、除草効果を調査した。結果を表23に示す。

表 2 3

化合物番号	薬量(g a.i. /ha)	イヌビエ	エノコログサ
1-0001	1000	5	5
1-0002	1000	5	5
1-0003	1000	5	5
1-0004	1000	5	5
1-0005	1000	5	5
1-0006	1000	5	4
2-0001	1000	5	5
2-0003	1000	5	5
2-0004	1000	5	5
2-0005	1000	5	5
2-0006	1000	5	4
2-0007	1000	4	4
2-0008	1000	5	5
2-0011	1000	5	4
2-0012	1000	5	5
3-0002	1000	5	5
3-0004	1000	5	5
3-0006	1000	4	4
3-0008	1000	5	5
3-0009	1000	5	5
3-0012	1000	5	5
3-0013	1000	5	5
3-0015	1000	5	5
3-0016	1000	5	5
3-0017	1000	5	5
3-0018	1000	5	5
3-0019	1000	5	5
3-0020	1000	5	5
3-0034	1000	5	5
3-0035	1000	5	5
3-0036	1000	5	5
3-0037	1000	5	5
3-0038	1000	5	5
3-0039	1000	5	5
3-0040	1000	5	5
3-0041	1000	5	5
3-0043	1000	5	5

3-0044	1000	5	5
3-0047	1000	5	5
3-0048	1000	5	5
3-0049	1000	5	5
3-0050	1000	5	5
3-0053	1000	5	5
3-0054	1000	5	5
3-0054	1000	5	5
3-0056	1000	5	5
3-0059	1000	5	5
3-0060	1000	5	5
3-0063	1000	5	5
3-0070	1000	4	4
3-0072	1000	5	5
3-0073	1000	5	5
3-0074	1000	5	5
3-0081	1000	5	5
3-0082	1000	5	5
3-0083	1000	5	5
3-0084	1000	5	5
3-0085	1000	5	5
3-0086	1000	5	5
3-0087	1000	5	5
3-0088	1000	5	4
3-0091	1000	5	5
3-0114	1000	5	5
3-0115	1000	5	5
3-0117	1000	5	5
3-0118	1000	5	5
3-0119	1000	5	5
3-0120	1000	5	5
3-0121	1000	5	5
3-0124	1000	5	5
3-0125	1000	5	5
3-0126	1000	5	5
3-0127	1000	5	5
3-0128	1000	5	5
3-0129	1000	5	5
3-0130	1000	5	5

3-0131	1000	5	5
3-0134	1000	5	5
3-0135	1000	5	5
3-0136	1000	5	5
3-0137	1000	5	5
3-0138	1000	4	5
3-0139	1000	5	5
3-0142	1000	5	5
3-0143	1000	5	5
3-0144	1000	5	5
3-0153	1000	5	5
3-0156	1000	5	5
3-0173	1000	5	5
3-0174	1000	5	5
3-0180	1000	5	5
4-0001	1000	5	5
4-0001	1000	4	3
4-0002	1000	5	5
4-0005	1000	5	5
4-0006	1000	5	5
4-0007	1000	5	5
4-0008	1000	5	5
5-0001	1000	5	5
5-0002	1000	5	5
5-0003	1000	5	5
5-0005	1000	5	4
5-0006	1000	5	5
5-0007	1000	5	5
6-0001	1000	5	5
6-0003	1000	5	5
6-0004	1000	5	5
7-0002	1000	5	5
7-0004	1000	5	4
7-0006	1000	5	5
7-0007	1000	5	4
7-0008	1000	5	5
7-0009	1000	5	5
8-0001	1000	5	5
8-0004	1000	5	5

8-0005	1000	5	4
8-0007	1000	5	5
9-0001	1000	5	5
9-0005	1000	5	4
9-0006	1000	5	4
9-0007	1000	4	4
9-0008	1000	5	5
10-0003	1000	5	5
10-0004	1000	5	5
10-0005	1000	5	5
10-0006	1000	5	4
10-0009	1000	5	5
10-0012	1000	5	4
10-0013	1000	5	5
10-0014	1000	5	5
10-0015	1000	5	5
10-0016	1000	5	4
10-0017	1000	5	5
10-0018	1000	5	5

〈試験例3〉 畑地茎葉処理による除草効果試験

80cm²プラスチックポットに砂を充填し、イヌビエ、エノコログサの種子を播種し、温室内で2週間育成後、製剤例1に準じて調製した水和剤を水に希釈し、

5 1ヘクタール当り有効成分が1000gになる様に、1ヘクタール当り1000lを小型噴霧器で植物体の上方から全体に茎葉散布処理した。その後、温室内で育成し、処理14日目に表21の基準に従って、除草効果を調査した。結果を表24に示す。

表 2 4

化合物番号	薬量(g a.i. /ha)	イヌビエ	エノコログサ
1-0001	1000	5	4
1-0004	1000	5	4
2-0001	1000	5	4
2-0003	1000	5	4
2-0004	1000	5	4
2-0008	1000	5	5
2-0011	1000	5	4
3-0008	1000	4	4
3-0010	1000	5	4
3-0011	1000	5	4
3-0013	1000	5	5
3-0015	1000	5	4
3-0035	1000	4	4
3-0036	1000	4	4
3-0037	1000	5	4
3-0038	1000	5	5
3-0039	1000	5	5
3-0044	1000	5	4
3-0049	1000	4	4
3-0073	1000	5	4
3-0074	1000	5	4
3-0076	1000	5	4
3-0077	1000	5	4
3-0081	1000	4	4
3-0082	1000	4	4
3-0083	1000	4	4
3-0084	1000	4	4
3-0085	1000	4	4
3-0086	1000	4	4
3-0092	1000	4	4
3-0104	1000	5	4
3-0105	1000	5	4
3-0106	1000	5	4
3-0107	1000	5	5
3-0115	1000	5	4
3-0118	1000	5	4
3-0119	1000	5	4

3-0120	1000	5	5
3-0144	1000	5	5
4-0002	1000	5	4
4-0005	1000	5	4
5-0001	1000	5	4
5-0002	1000	5	5
5-0003	1000	5	4
5-0007	1000	5	5
6-0004	1000	5	4
7-0008	1000	5	5
7-0009	1000	4	4
8-0001	1000	5	4
9-0001	1000	4	4
9-0005	1000	4	4
9-0008	1000	4	4

産業上の利用可能性

一般式 [I] で表される本発明の化合物は、畑地において問題となる種々の雑草、例えばオオイヌタデ (*Polygonum lapathifolium* L. subsp. *nodosum* (Pers.)

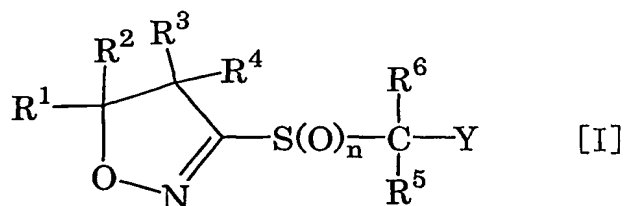
- 5 Kitam.)、アオビユ (*Amaranthus viridis* L.)、シロザ (*Chenopodium album* L.)、ハコベ (*Stellaria media* (L.) Villars)、イチビ (*Abutilon theophrasti* Medik.)、アメリカキンゴジカ (*Sida spinosa*)、アメリカツノクサネム (*Sesbaria exaltata*)、アサガオ (*Ipomoea* spp.)、オナモミ (*Xanthium strumarium* L.) 等の広葉雑草をはじめ、ハマスゲ (*Cyperus rotundus* L.)、キハマスゲ (*Cyperus esculentus*)、
- 10 ヒメクグ (*Kyllinga brevifolia* Rottb. subsp. *leiolepis* (Fraxch. et Savat.) T. Koyama)、カヤツリグサ (*Cyperus microiria* Steud.)、コゴメガヤツリ (*Cyperus iria* L.) 等の多年生および1年生カヤツリグサ科雑草、ヒエ (*Echinochloa crusgalli* (L.) Beauv. var. *crus-galli*)、メヒシバ (*Digitaria ciliaris* (Retz.) Koeler)、エノコログサ (*Setaria viridis* (L.) Beauv.)、スズメノカタビラ (*Poa*
- 15 *annua* L.)、ジョンソングラス (*Sorghum halepense* (L.) Pers.)、ノスズメノテ

ツボウ (*Alopecurus myosuroides* Huds)、野生エンバク (*Aveua fatua* L.) 等のイネ科雑草の発芽前から生育期の広い範囲にわたって優れた除草効果を発揮する。また、水田に発生するタイヌビエ (*Echinochloa oryzicola* Vasing.)、タマガヤツリ (*Cyperus difformis* L.)、コナギ (*Monochoria vaginalis* (Burm. f.) Presl. var. *plantaginea* (Roxb.) Solms-Laub.)、アゼナ (*Lindernia procumbens*) 等の一年生雑草及びウリカワ (*Sagittaria trifolia* L.)、オモダカ (*Sagittaria pygmaea* Miq.)、ミズガヤツリ (*Cyperus serotinus* Rottb.)、クログワイ (*Eleocharis kuroguwai* Ohwi)、ホタルイ (*Scirpus juncooides* Roxb. subsp. *hotarui* (Ohwi) T. Koyama)、ヘラオモダカ (*Alisma canaliculatum*) 等の多年生雑草を防除することもできる。

一方、本発明の除草剤は作物に対する安全性も高く、中でもイネ、コムギ、オオムギ、トウモロコシ、グレインソルガム、ダイズ、ワタ、テンサイ等に対して高い安全性を示す。

請求の範囲

1. 一般式 [I] を有するイソオキサゾリン誘導体又はその薬理上許容される塩：



5 式中、

R^1 及び R^2 は、同一又は異なって、水素原子、C1～C10アルキル基、C3～C8シクロアルキル基又はC3～C8シクロアルキルC1～C3アルキル基を示すか、或いは R^1 と R^2 とが一緒になって、これらの結合した炭素原子と共に形成したC3～C7のスピロ環を示し、

- 10 R^3 及び R^4 は、同一又は異なって、水素原子、C1～C10アルキル基又はC3～C8シクロアルキル基を示すか、或いは R^3 と R^4 とが一緒になって、これらの結合した炭素原子と共に形成したC3～C7のスピロ環を示し、更に R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 はこれらの結合した炭素原子と共に5～8員環を形成することもでき、

R^5 及び R^6 は、同一又は相異なって、水素原子又はC1～C10アルキル基を示し、

- 15 Yは窒素原子、酸素原子及び硫黄原子より選択される1以上の任意のヘテロ原子を有する5～6員の芳香族ヘテロ環基又は芳香族ヘテロ縮合環基を示し、これらのヘテロ環基は置換基群 α より選択される、0～6個の同一又は相異なる基で置換されていてもよく、又、隣接したアルキル基同士、アルコキシ基同士、アルキル基とアルコキシ基、アルキル基とアルキルチオ基、アルキル基とアルキルスルホニル基、
- 20 アルキル基とモノアルキルアミノ基又はアルキル基とジアルキルアミノ基が2個結合して1～4個のハロゲン原子で置換されてもよい5～8員環を形成されていてもよく、又、これらのヘテロ環基のヘテロ原子が窒素原子の時は酸化されてN＝

オキシドになってもよく、

nは0～2の整数を示す。

「置換基群 α 」

- 水酸基、チオール基、ハロゲン原子、C1～C10アルキル基、置換基群 β より選
- 5 択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキル基、C1～C4ハロアルキル基、C3～C8シクロアルキル基、C1～C10アルコキシ基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルコキシ基、C1～C4ハロアルコキシ基、C3～C8シクロアルキルオキシ基、C3～C8シクロアルキルC1～C3アルキルオキシ基、C1～C10アルキルチオ基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ
- 10 置換されたC1～C10アルキルチオ基、C1～C4ハロアルキルチオ基、C2～C6アルケニル基、C2～C6アルケニルオキシ基、C2～C6アルキニル基、C2～C6アルキニルオキシ基、C1～C10アルキルスルフィニル基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルスルフィニル基、C1～C10アルキルスルホニル基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルフィニル基、置換基群 γ より選択
- 15 される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルスルホニルオキシ基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基、C1～C10アルキルスルホニルオキシ基、C1～C4ハロアルキルスルホニルオキシ基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいフェノキシ基、置換されていてもよいフェニルチオ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環オキシ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環チオ基、置換されていてもよいフェニルスルフィニル基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、置換されていてもよいフェニルスルホニルオキシ基、アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボ
- 20 ニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、カルボキシ基、C1～C10アルコ
- 25

キシカルボニル基、置換されていてもよいベンジルオキシカルボニル基、置換されていてもよいフェノキシカルボニル基、シアノ基、カルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基又は置換されていてもよいフェニル基で置換されていてもよい。）、C1～C6アシルオキシ基、C1～C4ハロアルキルカルボニルオキシ基、置換されていてもよいベンジルカルボニルオキシ基、置換されていてもよいベンゾイルオキシ基、ニトロ基、アミノ基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基、置換されていてもよいフェニル基、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいベンジルスルホニル基又は置換されていてもよいフェニルスルホニル基で置換されていてもよい。)

「置換基群β」

水酸基、C3～C8シクロアルキル基（該基はハロゲン原子又はアルキル基で置換されてもよい）、C1～C10アルコキシ基、C1～C10アルキルチオ基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C10アルコキシカルボニル基、C2～C6ハロアルケニル基、アミノ基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基で置換されていてもよい）、カルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基で置換されていてもよい）、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、C1～C10アルコキシイミノ基、シアノ基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいフェノキシ基

「置換基群γ」

C1～C10アルコキシカルボニル基、置換されていてもよいフェニル基、置換さ

れていてもよい芳香族ヘテロ環基、シアノ基、カルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基で置換されていてもよい。）

2. 0～6個の同一又は相異なる基で置換されていてもよいヘテロ環上の置換基群 α が、水酸基、ハロゲン原子、C1～C10アルキル基、置換基群 β より選択され

5 る任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキル基、C1～C4ハロアルキル基、C3～C8シクロアルキル基、C1～C10アルコキシ基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルコキシ基、C1～C4ハロアルコキシ基、C3～C8シクロアルキルオキシ基、C3～C8シクロアルキルC1～C3アルキルオキシ

基、C1～C10アルキルチオ基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルチオ基、C1～C4ハロアルキルチオ基、C2～C6アルケニ

10 ル基、C2～C6アルケニルオキシ基、C2～C6アルキニル基、C2～C6アルキニルオキシ基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいフェノキシ基、置換されていてもよいフェニルチオ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環オキシ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環チオ

基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、カルボキシル基、C1～C10アルコキシカルボニル基、シアノ基、カルバモイル基

置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいフェノキシ基、置換されていてもよいフェニルチオ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環オキシ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環チオ

15 基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、カルボキシル基、C1～C10アルコキシカルボニル基、シアノ基、カルバモイル基

置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいフェノキシ基、置換されていてもよいフェニルチオ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環オキシ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環チオ

20 基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいベン

置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいフェノキシ基、置換されていてもよいフェニルチオ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環オキシ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環チオ

置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、C1～C6アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいベン

25 置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいフェノキシ基、置換されていてもよいフェニルチオ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環オキシ基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環チオ

ジルスルホニル基又は置換されていてもよいフェニルスルホニル基で置換されていてもよい。) であるか、或いは、隣接したアルキル基同士、アルコキシ基同士、アルキル基とアルコキシ基、アルキル基とアルキルチオ基、アルキル基とアルキルスルホニル基、アルキル基とモノアルキルアミノ基又はアルキル基とジアルキルアミノ基が2個結合して1~4個のハロゲン原子で置換されてもよい5~8員環を形成されていてもよい請求項1に記載のイソオキサゾリン誘導体。

3. 0~6個の同一又は相異なる基で置換されていてもよいヘテロ環上の置換基群 α が、ハロゲン原子、C1~C10アルキル基、C1~C4ハロアルキル基、C1~C10アルコキシC1~C3アルキル基、C3~C8シクロアルキル基(該基はハロゲン原子又はアルキル基で置換されてもよい)、C1~C10アルコキシ基、C1~C4ハロアルコキシ基、C3~C8シクロアルキルC1~C3アルキルオキシ基、置換されていてもよいフェノキシ基、C1~C10アルキルチオ基、C1~C10アルキルスルホニル基、アシル基、C1~C4ハロアルキルカルボニル基、C1~C10アルコキシカルボニル基、シアノ基又はカルバモイル基(該基の窒素原子は同一又は異なってC1~C10アルキル基で置換されていてもよい)である請求項2に記載のイソオキサゾリン誘導体。

4. R^1 及び R^2 が、同一又は異なってメチル基もしくはエチル基、 R^3 、 R^4 、 R^5 及び R^6 が水素原子である請求項1、2又は3のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体。

5. Yが、窒素原子、酸素原子及び硫黄原子より選択される任意のヘテロ原子を有する5員環又は6員環の芳香族ヘテロ環基である請求項1、2、3又は4のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体。

6. Yが、チエニル基、ピラゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、ピリジル基又はピリミジニル基である請求項5に記載のイソオキサゾリン誘導体。

7. Yが、チオフェン-3-イル基、ピラゾール-4-イル基、ピラゾール-5

ーイル基、イソオキサゾールー4ーイル基、イソチアゾールー4ーイル基、ピリジンー3ーイル基又はピリミジンー5ーイル基である請求項6に記載のイソオキサゾリン誘導体。

8. Yが、チオフェンー3ーイル基で、置換基群 α がチオフェン環の2及び4位
5 に置換した請求項7に記載のイソオキサゾリン誘導体。

9. Yが、ピラゾールー4ーイル基で、置換基群 α がピラゾール環の3及び5位
に、更に1位に水素原子、C1～C10アルキル基、置換基群 β より選択される任意
の基でモノ置換されたC1～C10アルキル基、C1～C4ハロアルキル基、C3～C8
シクロアルキル基、C2～C6アルケニル基、C2～C6アルキニル基、C1～C10ア
10 ルキルスルフィニル基、C1～C10アルキルスルホニル基、置換基群 γ より選択さ
れる任意の基でモノ置換されたC1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロア
ルキルスルホニル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよい芳
香族へテロ環基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていても
よい芳香族へテロ環スルホニル基、アシル基、C1～C4ハロアルキルカルボニル基、
15 置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、
C1～C10アルコキシカルボニル基、置換されていてもよいベンジルオキシカルボ
ニル基、置換されていてもよいフェノキシカルボニル基、カルバモイル基（該基の
窒素原子は同一又は異なって、C1～C10アルキル基又は置換されていてもよいフ
ェニル基で置換されていてもよい）、アミノ基（該基の窒素原子は同一又は異なっ
20 て、C1～C10アルキル基、置換されていてもよいフェニル基、アシル基、C1～C
4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換
されていてもよいベンゾイル基、C1～C10アルキルスルホニル基、C1～C4ハロ
アルキルスルホニル基、置換されていてもよいベンジルスルホニル基又は置換され
ていてもよいフェニルスルホニル基で置換されていてもよい）が置換した請求項7
25 に記載のイソオキサゾリン誘導体

10. Yが、ピラゾール-5-イル基で、置換基群 α がピラゾール環の4位に、更に1位に水素原子、C1~C10アルキル基、置換基群 β より選択される任意の基でモノ置換されたC1~C10アルキル基、C1~C4ハロアルキル基、C3~C8シクロアルキル基、C2~C6アルケニル基、C2~C6アルキニル基、C1~C10アルキルスルフィニル基、C1~C10アルキルスルホニル基、置換基群 γ より選択される任意の基でモノ置換されたC1~C10アルキルスルホニル基、C1~C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよい芳香族ヘテロ環スルホニル基、アシル基、C1~C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、C1~C10アルコキシカルボニル基、置換されていてもよいベンジルオキシカルボニル基、置換されていてもよいフェノキシカルボニル基、カルバモイル基（該基の窒素原子は同一又は異なつて、C1~C10アルキル基又は置換されていてもよいフェニル基で置換されていてもよい）、アミノ基（該基の窒素原子は同一又は異なつて、C1~C10アルキル基、置換されていてもよいフェニル基、アシル基、C1~C4ハロアルキルカルボニル基、置換されていてもよいベンジルカルボニル基、置換されていてもよいベンゾイル基、C1~C10アルキルスルホニル基、C1~C4ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいベンジルスルホニル基又は置換されていてもよいフェニルスルホニル基で置換されていてもよい）が置換した請求項7に記載のイソオキサゾリン誘導体。

11. Yが、イソオキサゾール-4-イル基で、置換基群 α がイソオキサゾール環の3位及び5位に置換した請求項7に記載のイソオキサゾリン誘導体。

12. Yが、イソチアゾール-4-イル基で、置換基群 α がイソチアゾール環の3位及び5位に置換した請求項7に記載のイソオキサゾリン誘導体。

13. Yが、ピリジン-3-イル基で、置換基群 α がピリジン環の2位及び4位

に置換した請求項 7 に記載のイソオキサゾリン誘導体。

14. Y が、ピリミジン-5-イル基で、置換基群 α がピリミジン環の 4 位及び 6 位に置換した請求項 7 に記載のイソオキサゾリン誘導体。

15. n が 2 である請求項 1 ～ 14 のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体。

5 16. n が 1 である請求項 1 ～ 14 のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体。

17. n が 0 である請求項 1 ～ 14 のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体。

18. 請求項 1 ～ 17 のいずれかに記載のイソオキサゾリン誘導体又は薬理上許容される塩を有効成分として含有する除草剤。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP02/01015

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int.Cl⁷ C07D261/10, 261/12, 413/12, 498/04, 513/04, 413/14, 417/12, 261/20, 487/04, A01N43/80

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int.Cl⁷ C07D261/10, 261/12, 413/12, 498/04, 513/04, 413/14, 417/12, 261/20, 487/04, A01N43/80

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho	1992-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2002
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2002	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2002

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CAS (STN) , REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y A	JP 9-328483 A (Sankyo Co., Ltd.), 22 December, 1997 (22.12.97), Claims (Family: none)	1-8, 11, 13 15-18 9, 10, 12, 14
Y	WO 00/50410 A1 (Nippon Soda Co.), 31 August, 2000 (31.08.00), Full text & AU 200026912 A & JP 2000-297080 A	1-3, 5-8, 11, 13 15-18
Y	WO 99/23094 A1 (Nippon Soda Co.), 14 May, 1999 (14.05.99), Full text & EP 1031537 A1 & BR 9814832 A & AU 9896505 A & US 6147031 A & CN 1278259 A & JP 11-240872 A	1-8, 11, 13, 15-18

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.
 ☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:	"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"E" earlier document but published on or after the international filing date	"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)	"&" document member of the same patent family
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	

Date of the actual completion of the international search
09 April, 2002 (09.04.02)Date of mailing of the international search report
23 April, 2002 (23.04.02)Name and mailing address of the ISA/
Japanese Patent Office

Authorized officer

Facsimile No.

Telephone No.

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int. Cl⁷ C07D261/10, 261/12, 413/12, 498/04, 513/04,
413/14, 417/12, 261/20, 487/04, A01N43/80

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int. Cl⁷ C07D261/10, 261/12, 413/12, 498/04, 513/04,
413/14, 417/12, 261/20, 487/04, A01N43/80

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報 1992-1996年
 日本国公開実用新案公報 1971-2002年
 日本国実用新案登録公報 1996-2002年
 日本国登録実用新案公報 1994-2002年

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

CAS (STN), REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
Y	JP 9-328483 A (三共株式会社) 1997. 12. 22, 【特許請求の範囲】 (ファミリーなし)	1-8 11, 13 15-18
A		9, 10 12, 14

☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)

「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「&」 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

09.04.02

国際調査報告の発送日

23.04.02

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/JP)

郵便番号100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

荒木 英則

4C

3127

電話番号 03-3581-1101 内線 3450